

**T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**SIVI HAL NMR KUANTUM BİLGİSAYARIYLA
BAZI SİSTEMLERİN KUANTUM SİMÜLASYONU**

DOKTORA TEZİ

Deniz TÜRKPENÇE

Fizik Anabilim Dalı

**MAYIS 2013
SAMSUN**

**T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

FİZİK ANABİLİM DALI

**SIVI HAL NMR KUANTUM BİLGİSAYARIYLA
BAZI SİSTEMLERİN KUANTUM SİMÜLASYONU**

DOKTORA TEZİ

**DENİZ TÜRKPENÇE
07210506**

Tezin Savunma Tarihi: 10.05.2013

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Azmi GENÇTEN

**Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında
Deniz Türkpençe Tarafından Hazırlanan**

**SIVI HAL NMR KUANTUM BİLGİSAYARIYLA
BAZI SİSTEMLERİN KUANTUM SİMÜLASYONU**

**Başlıklı bu çalışma jürimiz tarafından/..../.....tarihinde yapılan sınav ile
DOKTORA tezi olarak kabul edilmiştir.**

Başkan :

Üye :

Üye :

Üye :

Üye :

/ /

**Prof. Dr. Recep Tapramaz
Enstitü Müdürü**

ÖNSÖZ

Teknolojideki hızlı gelişmeler ve boyutların minyatürleşmesi, klasik iletişim ve bilgi teknolojilerini yöneten yasaların kuantum yasalarınca belirlenmesine neden olmuştur. Bugüne kadar klasik elektronik ve enformasyon yasaları ile geliştirilen teknoloji günümüzde sınır noktaya dayanmış, 20. Yüzyılın başlarında klasik kuramlardan kuantum kuramlara geçilmesine benzer olarak şimdide kuantum teknolojilerine giriş yapılmaktadır.

Sadece Türkiye’de değil, dünyada çok yeni bir dal olan kuantum teknolojileri, hesap yapma, büyük sayıları çarpanlara ayırma, gizli iletişim, simülasyon, şifreleme ve şifre kırma gibi özellikle gizlilik ve askeri alanlar gibi büyük öneme sahip alanlarda klasik teknolojilere göre kıyaslanamaz farkta üstünlük vaat etmektedir. Bu nedenle devletler büyük fonlarla söz konusu alanlarda araştırma projelerini desteklemektedir. Bu çalışma, yukarıda sözü geçen alanlarla ilgili olan kuantum hesaplama ve kuantum simülasyon alanlarını içeren deneysel ve teorik uygulamaları içermektedir.

Bu bağlamda 1 yıllık deneysel kısmı Almanya Dortmund Teknik Üniversitesi’nde geçen bu çalışmaya katkı sunan Prof.Dr. Dieter Suter’e, ve çalışmanın yurt dışı kısmına maddi destek sağlayan YÖK Yürütme Kurulu’na en içten teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca tez izleme döneminde desteklerinden ötürü Doç. Dr. Erdal Kılıç’a ve Prof. Dr. Recep Tapramaz’a en samimi duygularıyla şükranlarımı belirtmek isterim. Ayrıca yüksek lisanstan beri beni bu alana yönlendiren ve motive eden değerli hocam, tez danışmanım Prof.Dr. Azmi Gençten’e sonsuz teşekkürlerimi borç bilirim.

10.05.2013

Deniz Türkpençe

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖNSÖZ.....	iv
İÇİNDEKİLER.....	v
1.GİRİŞ.....	1
2.GENEL BİLGİLER.....	7
2.1 Klasik Bilgi İşlem.....	7
2.1.1.Bilgi ve entropi.....	7
2.1.2.Turing makinesi ve mantık kapıları.....	8
2.1.3.Moore yasası.....	10
2.1.4.Hesaplama karmaşıklığı.....	11
2.2 Kuantum Mekaniği.....	12
2.2.1. Lineer cebir.....	16
2.2.1.a Lineer işlemciler ve matrisler.....	17
2.2.1.b Özel tanımlı işlemciler, tensör çarpımı, iz.....	18
2.2.2. Kuantum mekaniği postulatları.....	21
2.2.3. Yoğunluk matrisi ve kısmi iz.....	22
2.2.4. Eşevresizlik ve açık kuantum sistemler.....	23
2.2.5. Kuantum dolanıklık.....	24
2.3. Kuantum Hesaplama.....	25
2.3.1. Kubitler.....	25
2.3.2. Kuantum mantık kapıları.....	26
2.3.2.a. Kontrollü mantık kapıları.....	28
2.3.2.b. Çoklu kontrollü mantık kapıları.....	31
2.3.3. Kuantum devreler ve algoritmalar.....	32
2.3.3.a Kuantum Fourier dönüşüm algoritması.....	35
2.3.3.b Kuantum faz tahmin algoritması.....	38
2.3.4. Kuantum bilgisayar.....	41
2.4.Kuantum Simülasyon.....	42
2.5. NMR Spektroskopisi.....	44
2.5.1.Kimyasal kayma ve J çiftlenimi.....	46
2.5.2. NMR pulsları ve döner çerçeve.....	46
2.5.3.Durulma.....	47
2.5.4.Spektrometre ve spektrum.....	49
2.5.5. NMR yoğunluk matrisi.....	53
2.6. NMR Kuantum Simülasyon.....	55
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	59
3.1. NMR Kuantum kontrol.....	59
3.1.1.Sert ve yumuşak pulslar.....	59
3.1.2. Kompozit pulslar.....	61
3.1.3. Yeniden odaklama pulsları.....	62
3.1.4.Değişken alanlar.....	63
3.2. Kuantum Adyabatiklik.....	64
3.3.Sıvı-Hal Nmr Kuantum Hesaplama.....	65
3.3.1. NMR kuantum hal tomografisi.....	69

3.3.2. Safımsı haller.....	70
3.4. İteratif Faz Tahmini.....	72
3.5. Simülasyondan Bilgi Edinme.....	74
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	77
4.1. Harmonik Titreşken Taban Durum Simülasyonu.....	77
4.1.1. Adyabatik durum hazırlama.....	78
4.1.2. Kontrollü işlemcinin oluşturulması.....	80
4.1.3. Deney.....	81
4.2. Etilen Molekülü $2p-\pi$ Elektronları Taban Durum Simülasyonu.....	84
4.2.1. Algoritma ve hal hazırlama uygulamaları.....	85
4.2.3. Taban durum enerjisinin elde edilmesi.....	87
4.3. Tek Boyutlu Model Kuantum Sistem Dijital Simülasyonu.....	88
4.3.1. İki kubitlik kinetik enerji teriminin oluşturulması.....	88
4.3.2. Üç kubitlik kinetik enerji teriminin oluşturulması.....	90
4.3.3. Potansiyel enerji terimlerinin oluşturulması.....	91
4.3.4. Uygulama ve sonuçlar.....	92
4.4. Jahn-Teller Sistemi Kuantum Simülasyon Algoritması.....	95
4.4.1. Açık kuantum sistem olarak JT sistemi.....	95
4.4.2. $E \otimes b$ JT sistemi kuantum simülasyon algoritması.....	97
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	99
5.1 Sonuçlar.....	99
5.2 Öneriler.....	101
6. KAYNAKLAR.....	103
7. EKLER.....	111
7.1. Etilen Molekülü Simülasyonu Matlab Programı.....	110
7.2. Tek Boyutlu Model Kuantum Sistem Matlab Programı.....	111
8. ÖZGEÇMİŞ.....	115

ÇİZELGELER LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Çizelge 2.1: En temel mantık kapıları, ve doğruluk çizelgeleri.....	9
Çizelge 2.2: NOR, NAND ve EXOR mantık kapıları.....	10
Çizelge 2.3: Çok kullanılan bazı kuantum mekaniksel gösterimler.....	16
Çizelge 2.4: Bazı tek kubitlik kuantum mantık kapıları	27
Çizelge 2.5: Bazı iki kubitlik kuantum mantık kapıları	29
Çizelge 2.6: Deutsch algoritmasında olası x ve $f(x)$ değerleri	34
Çizelge 3.1: NMR kuantum hesaplamada en çok kullanılan moleküller	66
Çizelge 4.1: İterasyonlar sonucu elde edilen bit değerleri.....	82

ŞEKİLLER LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 2.1:	Bir Turing makinesinin temsili resmi..... 8
Şekil 2.2:	Tek bitlik bilgiyi temsil eden atom sayısındaki azalma..... 10
Şekil 2.3:	Hesaplama karmaşıklık sınıfları..... 12
Şekil 2.4:	Stern-Gerlach Deney düzeneği..... 13
Şekil 2.5:	Ardışık Stern-Gerlach Deney düzenekleri 14
Şekil 2.6:	Elektron girişim deneyi..... 14
Şekil 2.7:	Schrödinger'in kedisi..... 15
Şekil 2.8:	Genel bir $ \psi\rangle$ kubit durumunu gösteren Bloch küresi 26
Şekil 2.9:	İki kubitlik çeşitli matris özdeşlikleri ve devre sembolleri..... 30
Şekil 2.10:	Toffoli mantık kapısı..... 31
Şekil 2.11:	Düzgün kontrollü $R_4^3(R_a)$ mantık kapısının devre sembolü 32
Şekil 2.12:	Kuantum algoritmaları oluşturan elemanların devre sembolleri..... 32
Şekil 2.13:	Kuantum devre parçaları ve karşılık gelen matris temsilleri..... 33
Şekil 2.14:	Deutsch algoritması kuantum devre şeması 34
Şekil 2.15:	Bir n kubitlik QFT devresi..... 37
Şekil 2.16:	Permütasyon işlemcili QFT devresi..... 37
Şekil 2.17:	U işlemcisinin ek bir kubitte uygulanışı..... 39
Şekil 2.18:	Abrams-Lloyd özdeğer tahmin algoritması 40
Şekil 2.19:	Presesyon hareketi ve Zeeman yarılımları..... 45
Şekil 2.20:	Titreşken manyetik alan bileşenleri..... 47
Şekil 2.21:	Manyetizasyon bozunumu..... 48
Şekil 2.22:	rf pulsu ile transvers düzleme indirilen manyetizasyonun gelişimi..... 48
Şekil 2.23:	Tek kanal NMR spektrometresinin temel bileşenleri 49
Şekil 2.24:	NMR spektrometresinin alıcı birimi..... 50
Şekil 2.25:	Faz duyarlı NMR spektrumu..... 52
Şekil 2.26:	Faz kayması ve NMR sinyal şekillerinin değişimi 52
Şekil 2.27:	Simülasyon şeması..... 55
Şekil 3.1:	Döner çerçevede rf pulslarının ele alınışı 60
Şekil 3.2:	Katı cismin dönüleri..... 61
Şekil 3.3:	$(\pi)_y$ pulsu ile transvers manyetizasyonun yeniden odaklanması 62
Şekil 3.4:	İstenmeyen etkileşimlerin yeniden odaklanması..... 62
Şekil 3.5:	Değişken manyetik alanlar..... 63
Şekil 3.6:	Geçişlere çevrilen nüfuslar..... 69
Şekil 3.7:	Safımsı hallerin hazırlanması..... 71
Şekil 3.8:	İteratif faz tahmin algoritması..... 73
Şekil 3.9:	Ek kubit katkılı çıktı okuma algoritması..... 74
Şekil 4.1:	IPEA'nın NMR uygulaması..... 77
Şekil 4.2:	Sonda kubitin faz duyarlı NMR spektrumu..... 79
Şekil 4.3:	$O(k)$ işlemi sonrası faz duyarlı NMR spektrumu..... 82
Şekil 4.4:	Etilen molekülü..... 84
Şekil 4.5:	Moleküler $2p-\pi$ etilen için IPEA..... 86
Şekil 4.6:	Sonda kubitin faz duyarlı NMR spektrumu 86

Şekil 4.7:	$O(k)$ işleminin sonrası faz duyarlı NMR spektrumu	87
Şekil 4.8:	İki kubitlik kinetik enerji işlemcisi için devre şeması.....	90
Şekil 4.9:	Üç kubitlik kinetik enerji işlemcisi için devre şeması.....	90
Şekil 4.10:	İki kubitlik potansiyel enerji işlemcisi için devre şeması.....	91
Şekil 4.11:	Üç kubitlik potansiyel enerji işlemcisi için devre şeması.....	92
Şekil 4.12:	2 kubitlik sistemin farklı öz durumlarda bulunma olasılığı.....	93
Şekil 4.13:	3 kubitlik sistem için $ \langle U(t) \rangle $ sonucu.....	94
Şekil 4.14:	$E \otimes b$ JT problemini simüle eden kuantum devre şeması.....	97

KISALTMALAR

QC	Kuantum hesaplama
QIT	Kuantum bilgi teorisi
TM	Turing makinesi
QTM	Kuantum Turing makinesi
QED	Kuantum elektrodinamiği
NMR	Nükleer manyetik rezonans
AND	Ve
NOT	Değil
OR	Veya
NOR	Değil-veya
NAND	Değil-ve
EXOR	Özel veya
CNOT	Kontrol değil
CU	Kontrollü U
P	Polinomal
NP	Deterministik polinomal
QMA	Kuantum Merlin Artur
BQP	Bağlı kuantum polinomal
QFT	Kuantum fourier dönüşüm
PEA	Faz tahmin algoritması
IPEA	İteratif faz tahmin algoritması
ASP	Adyabatik durum hazırlama
FID	Serbest indüksiyon bozunması
\mathcal{H}	Hamiltoniyen
κ	Hilbert uzayı
rf	Radyofrekans
B_0	Dış manyetik alan
$\mathbb{1}$	Birim matris
σ	Pauli matrisi
ρ	Yoğunluk matrisi
ω	Larmor frekans
ϕ	Faz

SIVI HAL NMR KUANTUM BİLGİSAYARIYLA BAZI SİSTEMLERİN KUANTUM SİMÜLASYONU

ÖZET

Bu çalışma kuantum bilgi teknolojileri içinde önemli bir yeri olan kuantum simülasyon konusunda deneysel çalışma ve bazı teorik uygulamaları içermektedir. Bu çalışmada 2 kubitlik bir sıvı hal-NMR kuantum bilgisayar ile kuantum harmonik titreşici hamiltoniyeni taban durum simülasyonu deneysel olarak gerçekleştirilmiş ve taban durum enerjisi hesaplanmıştır. Deneyler Almanya-Dortmund Teknik Üniversitesi e-3 laboratuvarlarında 500 MHz Bruker-Avance ticari spektrometre ile gerçekleştirilmiştir. 2 kubitlik kuantum hafıza olarak d-6 asetonda çözülmüş ^{13}C etiketli kloroform molekülü kullanılmıştır. Taban durum enerji hesaplamasında metot olarak iteratif kuantum faz tahmin algoritması, taban durumunun simülasyonu içinse metot olarak adyabatik durum hazırlama kullanılmıştır. Simülasyon sonrası taban durum enerji bilgisi faz duyarlı NMR spektrumu kullanılarak bağlı fazlar üzerinden çıkarılmıştır. Ayrıca aynı teknikler kullanılarak etilen molekülü $2p-\pi$ elektronları sistemi taban durumu kuantum simülasyonu yapılmıştır. Simülasyon uygulaması 2 kubitlik sıvı hal-NMR kuantum hafıza hamiltoniyeninin numerik simülasyonu ile yürütülmüştür. Numerik simülasyon Matlab programı ile yapılmıştır. Ayrıca bu çalışmada evrensel kuantum bilgisayar ile tek boyutlu bazı kuantum sistemlerin dijital kuantum simülasyonu yürütülmüştür. İlgili simülasyon için karşılık gelen kuantum algoritmalar oluşturulup numerik olarak uygulanmıştır.

Ek olarak bu çalışmada ilk kez Jahn-Teller etkisinin simüle edildiği bir sistem için bir dijital kuantum simülasyon algoritması geliştirilmiştir. Bunun için Jahn-Teller sistemi bir açık kuantum sistem olarak yorumlanmıştır. Burada çift kat dejenere elektronik seviye bir kubitte, çevre etkisi ise tek boyutlu harmonik titreşici ile haritalanmıştır. Jahn-Teller etkisinin dijital kuantum simülasyonu için söz konusu global sistemin açık kuantum sistem ve çevre sistem olarak yorumlanması, bu fikrin uygulanması aşamasında Jahn-teller sisteminin tipik davranışları kadar eşevresizlik etkilerinin de incelenmesine olanak sağlayacaktır.

Anahtar Kelimeler: Dijital kuantum simülasyon, Sıvı hal-NMR kuantum bilgisayar, Adyabatik durum hazırlama, iteratif faz tahmin algoritması, Açık kuantum sistem, Eşevresizlik.

QUANTUM SIMULATION OF SOME SYSTEMS BY USING LIQUID STATE NMR QUANTUM COMPUTER

ABSTRACT

This study includes an experimental and theoretical applications about quantum simulation which has an important position in quantum information technologies. In this study, ground state hamiltonian simulation of an harmonic oscillator was realised experimentally by a two qubit liquid state NMR quantum computer and the ground state energy was calculated. Experiments were implemented in Dortmund Technical University e-3 Labs by 500 MHz Bruker-Avance commercial spectrometer. ^{13}C -labeled chloroform molecule dissolved in d-6 acetone was used as a two-qubit NMR quantum register. Iterative phase estimation algorithm was used as a method for ground state energy calculation and adiabatic state preparation was used as a method for ground state simulation. After the simulation ground state energy information was extracted via relative phases by using a phase sensitive NMR spectrum. Moreover, by using the same methods ethylene molecule $2p-\pi$ electrons ground state quantum simulation is realized. The simulation application is implemented by a numerical simulation of a two qubit liquid state NMR quantum register hamiltonian. Numerical simulation is implemented by Matlab program. And also, in this study a digital quantum simulation of some one-dimensional quantum systems were performed by a universal quantum computer. The corresponding quantum algorithms were constructed and implemented numerically for the related simulation.

Additionally for the first time in this study, a digital quantum algorithm is constructed for a system which simulates the Jahn-Teller effect. For this proposal the Jahn-Teller system was interpreted as an open quantum system. At this point doubly degenerate electronic state was mapped as a qubit and the environment effect was mapped as a one dimensional harmonic oscillator. Interpretation of Jahn-Teller system as a global system including an open quantum system and an environment, will let the one to also search the decoherence effects as well as the typical behaviors of the Jahn-Teller system.

Key Words: Digital quantum simulation, Liquid state NMR quantum computer, Adiabatic state preparation, Iterative phase estimation algorithm, Open quantum system, Decoherence.

1. GİRİŞ

Klasik bilgi teorisi, klasik bilginin işlenmesi ve iletilmesi için kurgulanmış matematiksel bir modeldir. Klasik bilgi, klasik mantık kapılarınca yürütülen mantık işlemleriyle işlenir ve hesaplama araçlarına uygun dile dönüştürülür. Kuantum hesaplama (QC) ve kuantum bilgi teorisi (QIT) kuantum bilgisinin işlenişi, klasik ve kuantum kanallarla taşınması, kuantum sistemlerin entropisi ile ilgili temel sorulara cevap aramaktadır [1].

Günümüz bilgi işlem donanımı olan bilgisayarın tarihine göz atmak için M.Ö. 300 yıllarına, iki sayının en büyük ortak böleninin Euclid algoritmasıyla keşfine, hatta Babil çivi yazısı tabletlerinde bazı algoritmik süreçlerin açıkça bulunduğu M.Ö. 1750'ye kadar gidilebilir [2]. Ne var ki bilgisayar bilimi ancak 19. Yüzyılın başlarında matematik ve mühendislik gibi diğer bilimlerden ayrılabilir duruma gelmiştir. 1854'te George Boole, Boolean cebiri olarak da bilinen matematikte olasılık ve mantık teorisini geliştirdi. 1900 yılında David Hilbert, Paris'te bir konferansta o tarihin en çok uğraşılan 23 problemini açıkladı. Listenin sonundaki problem 'karar problemi' olarak bilinecek olan herhangi bir matematiksel varsayımın doğruluğuna ya da yanlışlığına karar verebilen mekanik bir sürecin kurgulanıp kurgulanamayacağıyla ilgiliydi. Karar problemini bir derste duyan Alan Turing, karar probleminin doğruluğunu sınavacak 'mekanik' sistemi kelimesi kelimesine yorumlayarak bu süreci sağlayacak düşünsel bir makine tasarladı [3]. 1936 yılında yayınladığı ve daha sonradan Turing makinesi (TM) olarak bilinecek modele göre bir Turing makinesi herhangi bir algoritmik süreci verimli olarak simule edebilmektedir. Turing'in bu modeli ile modern programlanabilir bilgisayarların temeli atılmıştır. Turing'e göre sayılar ve özel sembollerden oluşan matematiksel ifadelerin makinesinde bir anlamı yoktur. Bunun yerine her bir ifade '0' ve '1' ler den ibaret dizilerle bire bir eşleştirilebilir. Böylece klasik bilginin temel birimi olan 'bit' kavramı ortaya çıkmaktaydı. 1947'de transistörün icadıyla ilk bilgisayarların inşasına başlandı.

Claude Shannon 1948'de yayınladığı çalışmalarıyla klasik bilgi teorisini matematiksel bir formülasyona oturttu [4]. İlk defa bilginin matematiksel tanımını yapan bu teoremlerden ilki olan Shannon'un 'gürültüsüz kanal kodlama teorisi' bir bilgi kaynağından alınan çıktıyı depolamak için ne kadar fiziksel kaynak gerektiğiyle; diğer teorem olan 'gürültülü kanal kodlama teorisi' ise gürültülü iletişim kanallarından ne kadar bilginin güvenilir şekilde iletilebileceği ile ilgileniyordu. Shannon, gürültülü iletişim kanallarında

bilginin aktarılması için hata düzeltme kodları önererek hata düzeltme ile iletilebilecek güvenilir bilginin miktarı için bir üst sınır koymuştur. Pratik olarak bu kodların nasıl uygulanacağını önermese de Shannon'un çalışmalarından sonra pek çok bilim adamı hata düzeltme kodları geliştirilerek önerilen üst sınıra yaklaşmıştır.

Klasik bilgisayar teknolojisinin gelişimi sırasında Gordon Moore adlı bilim adamı bilgisayar boyutlarının giderek küçüldüğünü ve 1 bitlik bilgiyi temsil eden madde miktarının giderek azaldığını fark ederek bilgisayarların hız ve gücünün her iki yılda bir iki kat artacağını öngören ve daha sonra Moore yasası olarak bilinen fikri ortaya atmıştır [1]. Moore yasasının günümüze kadar iyi işlediği gerçeği, boyutlardaki küçülmenin en sonunda kuantum bölgesine girileceği ve küçülmenin bir alt sınırı olduğunu vurgulamaktadır. Bu durum, klasik yasalarla yönetilen teknolojilerin, yerini kuantum mekanik yasalarca yönetilen hesaplama ve bilgi teori ve teknolojilerinin almasını kaçınılmaz kılmaktadır. 1980'li yılların başları, aynı anda hem kuantum yasalarınca çalışan bilgisayarların tartışılmaya başlandığı hem de kuantum teorisinin sonuçlarının en kapsamlı şekilde sınındığı zaman dilimine denk gelmektedir. Kuantum mekanik yasalara göre çalışan bilgisayarlar ve bilgi teorilerine geçilen sürecin literatür özetini vermeden önce kuantum mekaniğinin o güne kadarki gelişimine kısaca bakmak ve kuantum mekaniğinin bilgi teorisine sunduğu eşsiz kaynakları ayrıca incelemek gerekmektedir.

20. yüzyılın başları sadece bilgisayar biliminin geliştiği değil, paralel olarak kuantum mekaniğinin de ortaya çıktığı yıllardı. Klasik mekanik kurallarla çözülemeyen ışınma problemlerinin tartışılmasıyla ortaya çıkan, siyah cisim ışınması, fotoelektrik olay gibi art arda gelecek pek çok problemin üstesinden gelmek için geleneksel varsayımlardan vazgeçilmesi kuantum mekaniği doğurdu. Kuantum mekaniğinin doğuşu, gelişimi veya birlikte getirdiği felsefi tartışmalarla ilgili pek çok kaliteli yayın bulunmaktadır [5-9]. Kuantum bilgi teknolojileri açısından tarihi sürece bakıldığında asıl ilgili süreç kuantum mekaniğinin temel olarak 1927'de belirsizlik ilkesiyle tamamlanmasından sonraki döneme denk gelir. Kuantum mekaniğin sonuçları olan belirsizlik, üst üste binme ilkesi, dolanıklık gibi kavramlar fiziksel gerçekliğe aykırı olduğu gerekçesiyle Schrödinger ve Einstein tarafından kuşkuyla karşılandı. Schrödinger, 1935 yılında yayınladığı makalede üst üste binme ilkesini verdiği meşhur kedi örneği ile eleştirdi [10]. Aynı yıl Einstein ve arkadaşları Podolsky ve Rosen yerellik varsayımı altında kuantum mekaniğinin tamamlanmamış bir teori olduğunu gösteren bir çalışma yayınlamaya dolanıklık kavramının erken bir tartışmasını başlatmış oldular [11].

Bu tartışmalar 1964 yılında John Bell'in yerellik varsayımı altında ihlal edilmesi mümkün olmayan eşitsizlikler bulması ile laboratuvar ortamına taşındı [12]. Eşitsizlik fiziksel gerçekliğin yerel olup olmadığını şüpheye yer bırakmayacak kadar açık ve yerellik ilkesi doğru kabul edildiğinde ihlal edilmesi imkansız bir eşitsizlikti. Konuyla ilgili deneyler 1972'de başladı ve izleyen pek çok deneyle birlikte en kapsamlı deney olan 1982 yılındaki

Aspect deneyi eşitsizliklerin ihlal edildiğini gösterdi [13]. Günümüzde, fiziksel gerçekliğin yerel olmadığını söyleyen dolanıklık kavramı herhangi bir teoriye sahip olmasa bile kuantum şifreleme [14], yoğun kodlama [15], kuantum ışınlama [16] gibi pek çok uygulamayı olanaklı kılan tamamen kuantum mekaniksel bir kaynaktır.

Kuantum mekaniğinin tuhaf sonuçlarının sınanması çabalarının sonlarına gelirken bilgisayar bilimi araştırmacıları bilgi-işlemede farklı arayışlar içine girmeye çalışıyorlardı. 1973 yılında Charles Bennet, tersinir mantık işlemleri ile ilgili bir çalışma yayınladı [17]. Bu çalışmadan ilham alan Paul Benioff, kuantum mekaniksel bir Turing makinesi tanımladı [18]. Böylece kuantum hesaplama ve kuantum bilgi teorisinin temeli bu anlayışla atılmış oldu [1]. Bu çalışmadan sonraki en önemli çalışma ve ayrıca bir dönüm noktası olarak kabul edilen düşünce, 1982 yılında Richard Feynman'ın klasik ve kuantum sistemlerin birbirini verimli olarak simüle edip edemeyeceği soru ve tartışmalarına dayanıyordu [19]. Feynman, klasik sistemlerin kuantum mekaniksel sistemleri verimli olarak simüle edemeyeceğini fakat kuantum sistemlerin bunu yapabileceğini vurguluyor fakat evrensel bir kuantum simülâtör tanımlamıyordu.

Böylece kuantum simülasyon, kuantum bilgisayarların temel motivasyonu ve başlangıç problemi olarak ortaya çıkmaktaydı. Kuantum bilgisayarların klasik bilgisayarlara karşı işlemsel üstünlüğünü örneklendirerek gösteren ilk çalışma 1985 yılında David Deutsch'dan geldi. Deutsch, ilk defa bir kuantum devresi çizerek kuantum üst üste binme ilkesinin kullanılmasıyla elde edilen QTM (Kuantum Turing Makinesi) ve getirdiği hız artışını ispatladı [20]. Kuantum bilgisayarların gücünü en iyi anlatan, en sansasyonel keşif 1994 yılında Peter Shor'dan geldi. Shor, o güne kadar klasik bilgisayarlara verimli bir çözümü bilinmeyen 'büyük tamsayıların çarpanlara ayrılması' ve 'ayrık logaritma problemi' nin kuantum algoritmalarca verimli olarak hesaplanabileceğini keşfetti [21]. Bu keşiften sonra kuantum bilgisayarlar ve kuantum bilgi teorisine olan ilgi katlanarak arttı.

Feynman'ın 1982 yılında kuantum sistemlerin kuantum bilgisayarlar tarafından simüle edilmesi ile ilgili bıraktığı açık soru 1996 yılında Seth Lloyd tarafından cevaplandı. Lloyd, bu çalışmasında kuantum bilgisayarlarını evrensel kuantum simülâtörler olarak tanımladı [22]. Sıralanmamış bir listede arama algoritması olan klasik benzerlerinden daha hızlı çalışan bir diğer algoritma ise 1997 yılında Lov Grover tarafından bulundu [23]. Diğer yandan kuantum teknolojisine dayalı kuantum bilgi teorisi ve kuantum iletişim alanında da çalışmalar yapılmaktaydı.

1982 yılında Wotters ve Zurek bilinmeyen bir kuantum durumu için klasik bilgi süreçlerinde olduğu gibi kopyalama yapılamayacağını gösterdi [24]. Bu ispat, literatüre kopyalama yasağı (No cloning theorem) olarak geçti. Bennet ve Brassard, 1984 yılında kuantum tekniklerle nasıl şifreleme yapılacağını yayınladı [14]. Kuantum kanallardan klasik bilginin nasıl aktarılacağını araştıran Bennet ve Wiesner, 1992'de 'yoğun kodlama' adı

verilen bir süreçle tek kubitlik bilgi ile nasıl iki bitlik klasik bilginin gönderilebileceğini açıkladı [15]. 1993'te Bennet , Brassard, Wootters ve arkadaşları yoğun kodlamada olduğu gibi dolanıklığı kullanarak bilinmeyen bir kuantum durumunun kuantum kanallarıyla nasıl aktarılabilirliğini açıklayan bir kuantum devresi tasarladılar [16]. Kuantum telenakil olarak bilinen bu protokol, bilinmeyen kuantum durumunu, üzerinde bir ölçüm yapmadan aktardığı için kuantum kopyalama yasağı teoremine ters düşmemektedir. 1995 yılında Ben Schumacher, Shannon'un gürültüsüz kodlama teorisinin kuantum benzerini yayınladı [25]. Schumacher, bu çalışmada kubitleri ilk defa kuantum hesaplama bakımından elle tutulur araçlar olarak tanımladı. 1996 yılında ise iki bağımsız grup, klasik hata düzeltme kodlarından ilham alınarak gürültülü kuantum kanallarından bilgi aktarımında kullanılmak üzere kuantum hata düzeltme kodları geliştirdi [26,27].

Seth Lloyd'un 1996'da kuantum bilgisayarları evrensel kuantum simülasyonlar olarak tanımlamasından sonra küçük ölçekli kuantum bilgisayarların nasıl inşa edilebileceği fikri ivme kazandı. Optik kuantum bilgisayar için foton ölçüm teknolojisi Imamoğlu ve Yamamoto tarafından tartışıldı [28]. İyon tuzak kuantum bilgisayarı fikri ilk olarak Cirac ve Zoller tarafından ortaya atıldı [29]. Çekirdek spinlerinin kuantum hesaplamada kullanılması fikri ilk kez Di Vincenzo'ya aittir [30]. Ancak oda sıcaklığında çekirdek spinlerinin nasıl kuantum hesaplama amaçlı kullanılacağı Cory, Fahmy ve Havel tarafından 'safimsiz haller' bulunarak çözülmüştür [31]. Silikon bazlı çekirdek spin kuantum bilgisayarı Kane tarafından önerilirken [32], Imamoğlu, Vincenzo ve arkadaşları boşluk kuantum elektrodinamiği (Cavity QED) teknikleri ile elektron spini kuantum noktaları ile kuantum hesaplama fiziksel gerçekleştirilmesi için önermişlerdir [33]. Tüm bu çabalar sürerken Di Vincenzo, çalışabilir bir kuantum bilgisayar için belli kriterler geliştirerek kuantum bilgisayar olmaya aday fiziksel sistemin sağlaması gereken koşulları tanımladı [34].

Kuantum algoritmaların fiziksel sistemlerde uygulanmaya başlanmasından günümüze kadar Nükleer Manyetik Rezonans (NMR) spektroskopisi en çok uygulanan ve yayınlanan fiziksel metotlardan biri haline gelmiştir [35]. NMR ile yürütülen ilk kuantum algoritma Jones ve Mosca tarafından rapor edilmiştir [36]. Deutsch algoritmasının NMR ile yürütülmesiyle yapılan bu ilk uygulamadan sonra Grover algoritmasının NMR teknikleri ile uygulanması Chuang ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilmiştir [37]. Kuantum Fourier dönüşümünün (QFT) bir uygulaması ise NMR teknikleri kullanılarak 2000 yılında Vandersypen ve arkadaşları tarafından bildirilmiştir [38]. NMR teknikleri kullanılarak Shor algoritmasının yürütülmesi ise yine Vandersypen ve arkadaşları tarafından 2001 yılında rapor edilmiştir [39]. Bu çalışmada 7 kubitlik yapay bir molekül kullanılarak '15' sayısı çarpanlara ayrılmıştır.

Kuantum simülasyon literatürde analog ve dijital kuantum simülasyon olarak iki ayrı sınıfa ayrılmıştır [40]. Bunlardan ilki kuantum sistemlerin başka kuantum sistemler

kullanılarak simülasyonu iken diğeri kuantum sistemlerin evrensel bir kuantum bilgisayar kullanarak simülasyonu şeklindedir. Abrams ve Lloyd çok parçacıklı Fermi sistemler için dijital kuantum simülasyon rapor etmiş [41] , Zalka ise kuantum bilgisayarda genel bir kuantum simülasyon algoritması önermiştir [42]. İlk NMR kuantum simülasyon uygulaması klasik harmonik titreşicinin simülasyonu ile 1999'da Somaroo ve ark.'dan gelmiştir [43]. Tseng ve ark. ise etkileşen üç parçacıklı sistem problemini NMR teknikleri ile simule etmiştir [44]. Diğer simülasyon uygulamalarından bazıları ref. [45-50]'de derlenmiştir. 2005'te Guzik'in kuantum faz tahmin algoritması kullanarak kimya problemleri üzerine simülasyona dayalı çalışması kuantum simülasyon açısından bir diğer önemli noktadır [51]. Bu çalışmadan sonra kuantum kimyasının kuantum simülasyonu ile ilgili çeşitli çalışmalar yayınlanmıştır [52-57]. Kuantum kimyası simülasyonlarında sıkça kullanılan bir metot kuantum adyabatik teoridir [58]. Adyabatiklik kullanılarak çeşitli kuantum simülasyon çalışmaları rapor edilmiştir [49,59-60].

Bu çalışma, hem deneysel hem de teorik uygulamalarla kuantum simülasyonun değişik uygulamalarını ele almaktadır. Kuantum simülasyonun deneysel uygulaması QIT uygulamalarda en çok kullanılan metotlardan biri olan NMR metodu ile yapılmıştır. Öncelikle harmonik titreşici için taban durum simülasyonu 2-kubit NMR kuantum bilgisayar kullanarak deneysel olarak yürütülerek harmonik titreşicinin taban durum enerjisi iteratif faz tahmin algoritması kullanılarak hesaplanmıştır. Deneysel Almanya-Dortmund Teknik Üniversitesi e-3 laboratuvarlarında 500 MHz Bruker-Avance ticari spektrometre ile gerçekleştirilmiş olup 2-kubitlik kuantum hafıza için d-6 asetonda çözülmüş ¹³C etiketli kloroform molekülü kullanılmıştır. Safımsı haller uzaysal ortalama metoduyla hazırlanmıştır.

Diğer bir çalışmada etilen molekülü 2p- π elektronları sistemi hamiltoniyeni Pauli cebirine 2x2'lik bir matris temsili ile aktarılmış ve taban durum ve birinci uyarılmış durum uygun bir şekilde hesaplama bazlarına haritalanmıştır. NMR kuantum simülatör, Matlab programı ile simule edilerek etilen molekülü 2p- π elektronları sistemi taban durumu hazırlanarak taban durum enerjisi hesaplanmıştır.

Ayrıca bu tez çalışmasında tek boyutlu kuantum sistemlerde evrensel bir kuantum bilgisayar için dijital kuantum simülasyon algoritmaları geliştirilmiştir. Evrensel kuantum simülasyon için gerekli kuantum Fourier dönüşüm (QFT) işlemi metot olarak uygulanarak işlemcilerin ilgili baz temsillerinde köşegen olmaları sağlanmıştır. Çalışmada 2 ve 3 kubitlik durumlar için kinetik ve potansiyel enerji işlemcilerinin nasıl elde edildiği açıklanmış ve genelde komüte etmeyen bu işlemcilerin pratik uygulamalarda nasıl ayrıştırılması gerektiği anlatılarak uygulanmıştır. Diğer yandan güç bir iş olan bir kuantum sistemden nasıl bilgi elde edileceği materyal ve metot kısmında 'Simülasyondan Bilgi Elde Etme' başlığı altında anlatılarak sözü edilen simülasyon uygulamaları sonucunda ölçüm metotları olarak

benimsenmiştir. Uygulanan ölçüm işlemcileri ile geliştirilen algoritmalarından alınan sonuçlar tartışılmıştır.

Son olarak, bu çalışmada yine açık kuantum sistemler için bir dijital kuantum simülasyon algoritması tasarlanmıştır. Tasarlanan kuantum algoritma ilk defa bir Jahn-Teller sisteminin evrensel kuantum simülasyonunu öneren bir algoritma olmuştur. Jahn-Teller sisteminde $E \otimes b$ problemini çift kat dejenere bir kuantum sistemle çiftlenmiş tek boyutlu bir harmonik titreşici olarak modelleyen bu algoritmanın uygulama ayrıntıları verilerek ileriye yönelik önerilerde de bulunulmuştur.

2. GENEL BİLGİLER

2.1 Klasik Bilgi İşlem

Klasik bilgi teorisi, klasik bilginin depolanması ve aktarılmasıyla ilgilidir. Bilginin ne olduğunu tanımlamak güç bir iştir. Claude Shannon'un temel bilgi birimi olarak 'bit' leri tanımlaması bilgi teorisinin temelini oluşturmuştur [4]. Böylece bilgi, ikili sayı sistemindeki bitlere karşılık gelen '0' ve '1' lere çevrilebilen her türlü veri olarak tanımlanabilir.

Bitlerin ikili sayı sisteminde seçilmesi bilginin ölçülmesinde 2'yi logaritmik baz olarak kullanmayı gerektirir. Böylece iki ayırt edilebilir duruma sahip her aygıt bir bitlik bilgi depolama kapasitesine sahipken, özdeş n aygıt $\log_2^{2^n} = n$ bitlik bilgi depolama kapasitesine sahip olur. Bu aygıtların birleşimi 'hafıza' denen bilgi depolama ünitesini oluşturur.

Klasik bir iletişim kanalında sıralı olarak iletilen bir dizi karakterle ilgili Shannon bilgi tanımı, karakter dizisinin ne ölçüde iletilemeyeceği ile ilgili

$$I(x) = \log_2^{\frac{1}{p(x)}} = -\log_2^{p(x)} \quad (2.1)$$

şeklinde verilir. Burada x , verilen bir sinyal olayı, $p(x)$ ise x olayının gerçekleşme ihtimaline bağlı bir olasılıktır.

2.1.1 Bilgi ve entropi

Entropi ilk olarak ısı değişimi ve sıcaklığa bağlı olarak $dS = dQ/T$ şeklinde tanımlanırken Boltzman, 1887'de entropiyi $S = k \ln W$ olarak tanımlamıştır [61]. Burada k Boltzman sabiti, W ise girilebilir durum sayısıdır. Shannon ise bilgi kuramı bakımından entropiyi;

$$S(x) = -\sum_x p(x) \log_2^{p(x)} \quad (2.2)$$

şeklinde tanımlamıştır. Burada $p(x)$, (2.1) denkleminde olduğu gibi olayın gerçekleşme olasılığına ait bir ifadedir.

Denklem (2.2) incelendiğinde herhangi bir olayın olasılık dağılımı arttığında diğer bir deyişle olayla ilgili bilgi azaldığında entropi artmaktadır. Bu durum termodinamik bir örnekle açıklanabilir. Buna göre T_A ve T_B sıcaklığında izole A ve B sistemlerinin etkileşerek A'dan B'ye ısı akışı olduğu varsayalım. Tersinir olmayan bu süreçte A sisteminin entropisi

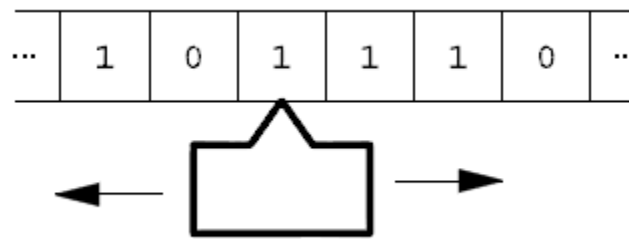
$\Delta S_A = \Delta Q/T_A$ kadar azalırken b sisteminin entropisi $\Delta S_B = \Delta Q/T_B$ kadar artacaktır. Fakat $T_A > T_B$ olduğundan B sistemindeki entropi artışı A sistemindeki azalmadan büyük olacağından genel sistemin entropisi artacaktır.

Bu durum, teker teker A ve B sistemlerinden daha büyük olan AB sisteminin girilebilir durumlarının veya olasılık dağılımlarının daha büyük olması sonucu sistemle ilgili bilginin azalmasının entropi artışına karşılık geldiğinin termodinamik örneğidir. Bu anlayışı Rolf Landauer 1961 yılında daha ileri götürerek hesaplamanın bilgi-işlemede enerji harcamadığını fakat bilgi silmenin enerji gerektirdiğini ortaya çıkardı [62]. Buna göre 1 bitlik bilginin silinmesi en az $kT \ln 2$ kadar enerji gerektirmekte ve entropide $kT \ln 2$ kadar artış meydana getirmektedir.

2.1. 2 Turing makinesi ve mantık kapıları

İngiliz matematikçi Alan Turing'in karar probleminin çözümü için geliştirdiği mekanik makine günümüz bilgisayarlarının temel çalışma ilkesini oluşturmaktadır. Turing makinesi adı verilen bu model gerçek bir makine değil fakat hesaplama eylemini resimleyen matematiksel bir fikirdir. Buna göre gerçek bir bilgisayar, bir Turing makinesinin fiziksel gerçekleştirilmesidir.

Turing makinesi şu bileşenlerden oluşur: Hürelere ayrılmış bir şerit, şerit okuyucu ve yazıcı bir kafa, şeritte yazılabilen semboller kümesi (alfabe), kafanın nasıl hareket edeceğini kontrol eden basit komutlar kümesi. Bu modele göre şerit bilgisayar hafızasına, komutlarda bilgisayar programına karşılık gelmektedir. Bir Turing makinesi Şekil-2.1'deki gibi resimlendirilebilir.

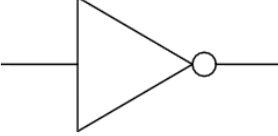
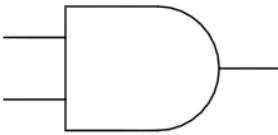
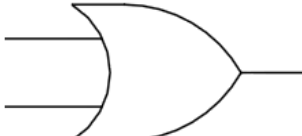


Şekil 2.1: Bir Turing makinesinin temsili resmi

Bilgisayar işlemlerini temel işlem basamaklarına bölmek pratik bir anlayıştır. Bu temel işlem basamakları mantık kapıları olarak bilinmektedir. Mantık kapıları, bitleri bir ilk durumdan alıp bir son duruma getiren mantıksal işlemlerdir.

En basit mantık kapıları NOT (değil), AND (ve) ve OR (veya) mantık kapılarıdır. AND ve OR mantık kapıları 2 bitlik girişe ve tek bitlik çıkışa sahip, tersinir olmayan mantık kapılarıdır. NOT mantık kapısı ise tek bitlik giriş ve çıkışa sahip tersinir bir mantık kapısıdır. Bir mantık kapısının etkisi en iyi doğruluk çizelgesi ile açıklanabilir. Bu mantık kapılarının devre sembolleri ve doğruluk çizelgeleri Çizelge-2.1’de verilmiştir.

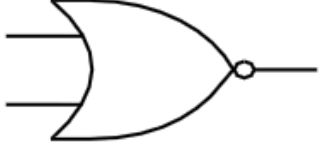
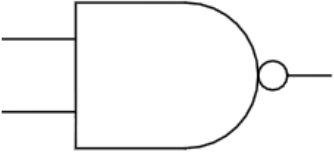
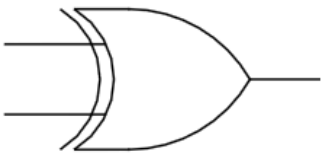
Çizelge-2.1: En temel mantık kapıları, devre sembolleri ve doğruluk çizelgeleri

Mantık Kapısı	Devre Sembolü	Doğruluk Çizelgesi	
		Giriş	Çıkış
NOT		0	1
		1	0
AND		00	0
		01	0
		10	0
		11	1
OR		00	0
		01	1
		10	1
		11	1

Bu mantık kapıları daha karmaşık mantık kapıları üretmek için birleştirilebilir. Bunlar, NOR (NOT-OR), NAND (NOT-AND) ve EXOR (Exclusive-OR) mantık kapıları olarak örneklendirilebilir. Bu mantık kapılarından XOR mantık kapısı koşullu bir NOT kapısıdır ve *kontrollü* bir mantık kapısı şeklindedir. Burada ilk bit kontrol bit, ikinci bit hedef bit olarak iş görmekte, ve kontrol bit ‘1’ durumunda iken hedef bite NOT kapısı uygulanmakta, ‘0’ durumunda iken ise hiçbir işlem yapılmamaktadır. Öte yandan NOR ve NAND mantık kapılarının uygun bir şekilde birleştirilmesiyle istenen herhangi bir mantıksal işlem inşa edilebilir. Bu nedenle bu mantık kapılarına *evrensel mantık kapıları* denilmektedir.

Diğer yandan evrensel mantık kapıları doğruluk çizelgelerinden anlaşılacağı üzere tersinir değildir bunların her bir işlemi $kT \ln 2$ kadar enerji kaybına neden olmakta ve entropiyi arttırmaktadır. Basit mantık kapılarının birleşmesinden oluşan mantık kapıları ve doğruluk çizelgeleri Çizelge-2.2’de verilmiştir.

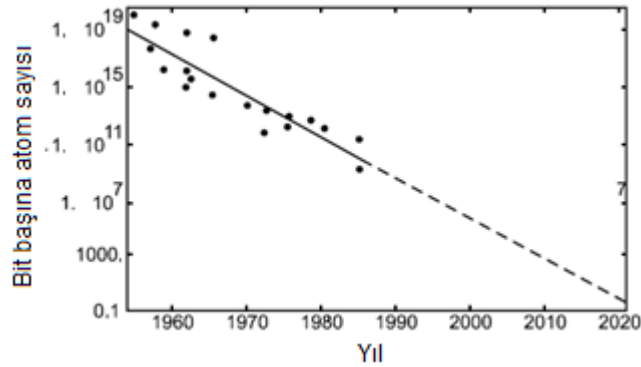
Çizelge-2.2: NOR, NAND ve EXOR mantık kapıları. Mantık kapılama ait devre sembolleri ve doğruluk çizelgeleri de verilmiştir

Mantık Kapısı	Devre Sembolü	Doğruluk Çizelgesi	
		Giriş	Çıkış
NOR		00	1
		01	0
		10	0
		11	0
NAND		00	1
		01	1
		10	1
		11	0
XOR		00	0
		01	1
		10	1
		11	0

Günümüz bilgisayarlarında bu mantık işlemleri transistörlerle sağlanmaktadır ve birim yüzey başına düşen transistör sayısı arttıkça bilgisayarların işlem hızları da artmaktadır.

2.1. 3 Moore yasası

1947'de ilk transistorun icadından sonra yarı iletken teknolojinin gelişmesiyle birlikte boyutların küçülmesi, bilgisayar teknolojisinde devrim sayılabilecek taşınabilirlik ve hız artışı olanaklarını mümkün kılmıştır.



Şekil 2.2: Tek bitlik bilgiyi temsil etmek için gerekli atom sayısındaki azalma [63]

Gordon Moore, 60'lı yılların başlarında her 18 ayda bir işlemci çiplerindeki transistör sayısının ikiye katlandığını fark ederek bu durumun bilgisayar çiplerindeki transistör sayısının zamanla üstel olarak artması olarak yorumladı [63]. Moore yasası olarak bilinen bu artış Şekil-2.2'de gösterilerek ileriye yönelik bir çıkarımda bulunulmuştur. Şekil-2.2'de görüldüğü gibi bir bitlik bilgiyi temsil eden atom sayısı giderek azalmakta ve en sonunda tek atomlu, kuantum olayların görülmeye başlandığı bölgeye girilmektedir.

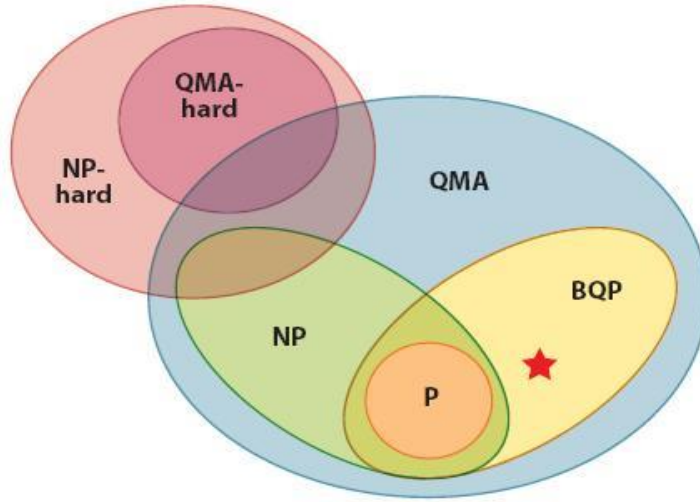
Mantık kapıların uygulandığı devreler klasik devre teorisiyle yönetilirken, tek atomlu bölge kuantum mekaniği yasalarıyla yönetilir. Bu durum, boyutlar açısından klasik bilgi-işlem ile çalışılacak alt sınıra ulaşıldığı ve kuantum bilgi işlem yasalarının geçerli olduğu bölgeye girildiği anlamına gelmektedir.

2.1.4 Hesaplama karmaşıklığı

Kuantum sistemlerinin kuantum bilgisayarları ile simülasyonunun klasik bilgi-sayarlarla yapılanlarla kıyaslayabilmek için hesaplama karmaşıklık teorisinin [64] bazı esaslarının tartışılması gerekir. Genel olarak, çözüm için 'verimli' bir algoritmaya sahip ve zaman ve sistem boyutları ile polinomal ölçekte büyüyen bir problem 'baş edilebilir' ya da 'kolay' olarak tanımlanır.

Karmaşıklık teorisine göre problemler güçlük ölçülerine göre sınıflara ayrılmıştır. Klasik bilgisayarlar (Klasik Turing Makinaları) için kolay olarak sınıflandırılmış problemler P sınıfı olarak adlandırılır. Bu problemler cevapları 0 yada 1 olan karar problemleridir. Öte yandan cevapları polinomal sürede doğrulanabilen tüm problemler NP sınıfı olarak kabul edilir. Örneğin sayıların çarpanlara ayrılması ile ilgili verimli bir algoritma olmasa da çarpanlara ayrılmış bir sayının doğru olarak ayrılmış olup olmadığını sadece çarpma işlemi ile doğrulanabilir. Bu yüzden sayıların çarpanlara ayrılması problemi P olmadığı halde çarpanlara ayrılmış sayı polinomal sürede doğrulandığından doğrulama problemi NP sınıfıdır. Bu nedenlerden dolayı $P \subseteq NP$ olduğu açıktır fakat $P = NP$ önermesi hala açık bir sorudur.

Öte yandan NP sınıfı problemlerin 'zor' olarak adlandırılan NP-zor kümesi de bulunmaktadır. Eğer bir NP-zor sınıfı problem verimli bir şekilde çözülebilirse bu, tüm NP sınıfı problemlerinde verimli bir şekilde çözülebildiğini göstermiş olur. Kuantum bilgisayarlarınca kolay olarak sınıflandırılacak problemler BQP olarak adlandırılmaktadır. Hem klasik hem de kuantum bilgisayarlar için karmaşıklık sınıfları arasındaki ilişki, Şekil 2.1'deki şemada verilmiştir. NP sınıfı problemlerin kuantum benzeri QMA olarak tanımlanmakta ve kuantum bilgisayarlarında kolayca sınılanabilen problemleri içermektedir.



Şekil 2.3: Hesaplama karmaşıklık sınıfları. Kuantum kimyasına ilişkin sistemlerin kuantum simülasyonu problemi yıldızla belirtilen BQP sınıfında yer almaktadır [40]

NP-zor sınıfı problemlerin benzeri olarak da QMA-zor sınıfı problemler kuantum bilgisayarlarının onay problemlerinin en zorlarını içermektedir. Shor'un sayıları çarpanlara ayırmasıyla ilgili kuantum algoritmasının keşfi [21], kuantum bilgisayarlarını ilgi odağı haline getirmiş, kuantum bilgisayarlarla ilgili araştırmalarında patlamaya yol açmıştır. Peter Shor, geliştirdiği algoritmayla klasik bilgisayarlar için P sınıfı dışında olan yani zor olan çarpanlara ayırma probleminin kuantum bilgisayarlarınca polinomal zamanda çözülebileceğini ispatlamıştır.

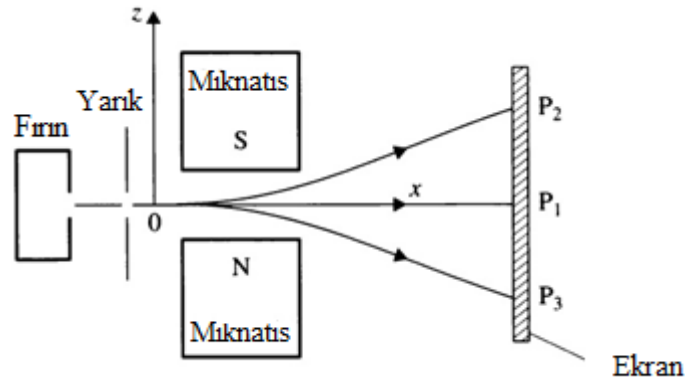
2.1 Kuantum Mekaniği

Kuantum mekaniği, nükleer fiziğin, katıhal fiziğinin, lazer teorisinin, moleküler fiziğin ve bu bilimlerin ışığında ortaya çıkmış tüm pratik kullanımların temelini oluşturan fiziksel ve matematiksel bir formülasyondur. Max Planck'ın siyah cisim ışınması problemini radyasyonun tanecikli bir yapıda olduğu kabulü ile çözmesi (1900), Einstein'ın fotoelektrik olayda ışığın tanecikli yapıda olduğunu yayınlaması (1905), Bohr'un hidrojen atomunun enerji seviyelerinin kesikli yapıda olduğunu ortaya çıkarması (1913), kuantum mekaniğini ortaya çıkaran bilindik tarihsel sürecin başlangıcıdır.

Takip eden dönemde Broglie, dalga ve parçacık özelliklerini temsil eden dalga boyu ve lineer momentumu aynı bağıntıda göstererek ($\lambda = \frac{h}{p}$) parçacıkların dalgalarla temsil edilebileceğini önerdi (1923). Avusturyalı bilim adamı Schrödinger ise klasik dalga denklemlerinden hareketle parçacıkları temsil eden dalgaların zamana göre gelişimini veren bir denklem buldu (1925). Daha sonradan Schrödinger denklemini olarak bilinecek bu denklemle bazı basit sistemlerin çözümü yapılabildi. Werner Heisenberg aynı çözümlerin matrislerle de yapılabildiğini göstererek kuantum mekaniğinin lineer cebir yönünü göstermiş

oldu. Fakat Heisenberg'in kuantum mekaniğine asıl katkısı eşlenik gözlenebilirlerin aynı hassasiyetle ölçülemeyeceğini söyleyen *belirsizlik ilkesini* bulması ile olmuştur (1927). Bu ilkeye göre, örneğin presesyon hareketi yapan bir topacın klasik açısal momentumunun x ve z bileşenlerinin aynı anda ölçülebilirken klasik presesyon hareketi ile modellenmiş bir elektron spininin x ve z bileşenlerinin ölçümü aynı hassasiyetle yapılamaz. Hem belirsizlik etkisi hem de ölçme problemi olarak bilinen bu durum, Stern-Gerlach deneyi ile anlaşılabilir.

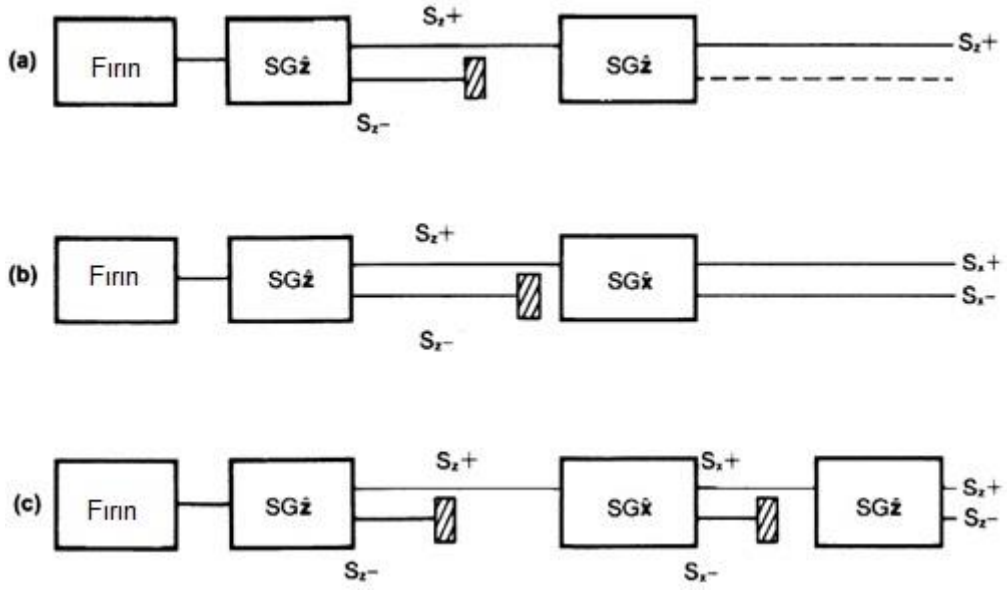
1921 yılında atomların manyetik momentlerini anlamak için Stern tarafından tasarlanan deney, 1922 yılında Stern ve Gerlach tarafından gerçekleştirildi. Buharlaştırılmış gümüş atomlarının değişken bir manyetik alan içine gönderilmesi sonucu buhar demetinin Şekil-2.4'te olduğu gibi ekranda iki parçaya ayrılması beklenmedik bir sonuçtu.



Şekil 2.4: Stern-Gerlach deney düzeneği [65]

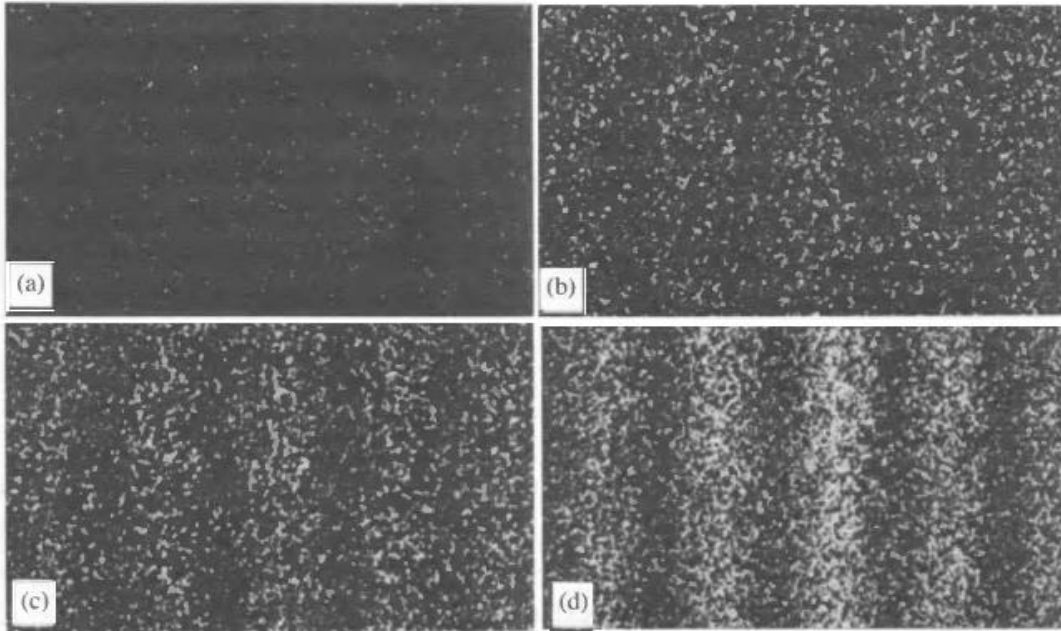
Bu sonuç 1925 yılında Goudsmit ve Uhlenbeck tarafından elektronların orbital açısal momente ek olarak içsel başka bir açısal momente sahip olması gerektiği şeklinde yorumlandı böylece elektron spinini bulunmuş oldu.

Ancak Stern-Gerlach deneyi elektron spinini keşfi dışında, kuantum mekaniğinin belirsizlik ve ölçme kavramları konusunda en güzel örnekleri sergilemesi açısından da önemlidir. Bunun için Şekil-2.5'te gösterildiği gibi ardışık Stern-Gerlach düzenekleri kullanılmaktadır. Şekil-2.5'teki gibi fırından çıkan atom demetine z yönünde bir ölçüm yapıldığında beklendiği gibi demet ikiye ayrılmaktadır. (+) ve (-) olarak ikiye ayrılan demetin (-) yöne sapan kısmı kapatılarak (+) yoldan giden demet yeniden z yönlü ölçmeye maruz bırakıldığında sadece (+) yönlü demetin aygıttan çıktığı görülmektedir. Diğer taraftan (+) yönden çıkan demetin Şekil-2.5b'te görüldüğü gibi ikinci ölçümde z yerine x doğrultuda ölçüm yapıldığında demetin bu kez tekrar iki parçaya ayrıldığı ve Şekil-2.5c'deki gibi bu yollardan (-) olan kapanıp tekrar bir z ölçümü yapıldığında yeniden demetin iki parçaya ayrıldığı gözlenmektedir.



Şekil 2.5: Ardışık Stern-Gerlach deney düzekleri [66]

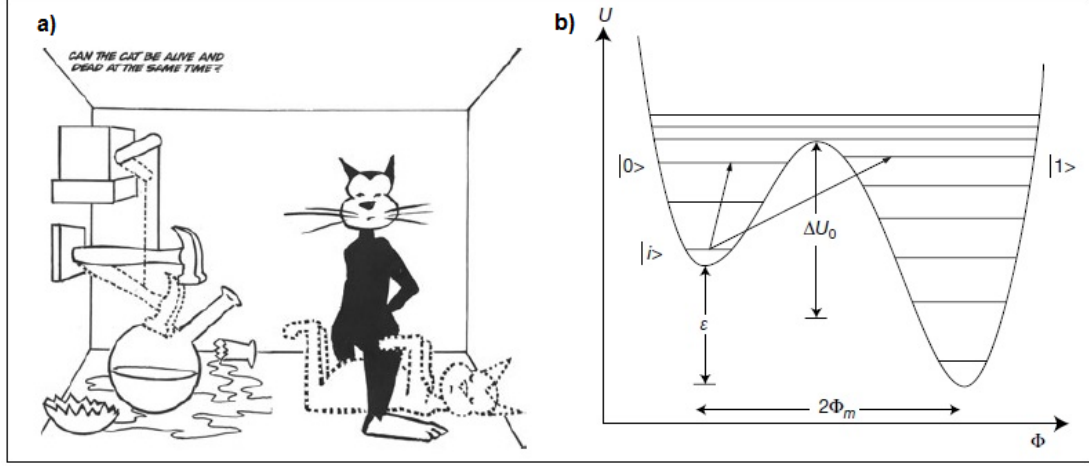
Tüm bu sonuçlar kuantum sistemler üzerindeki ölçümlerin sistemler, belli öz durumlara indirgediği, aynı öz duruma aynı ölçüm yapıldığında aynı sonuçların alındığı fakat farklı bir ölçüm yapıldığında sistemin 'hafızasını' kaybettiği ve sonucun belirsizleşerek yeni öz durumların ortaya çıktığı şeklinde yorumlanabilir [66]. Kuantum mekaniğinin doğasını göz önüne seren diğer bir deney parçacıklarla yapılan çift yarık deneyidir [67].



Şekil 2.6: Elektron girişim deneyi. Seyrek gönderilen elektronların etkilerinin biriktirilmesi ile ekranda oluşan girişim deseni [67] a) 100 elektron b) 3000 elektron c) 20 000 elektron d) 70 000 elektron ile oluşan girişim deseni

1989 yılında elektronlarla yapılan çift yarık deneyinde Şekil-2.6'da açıkça görüldüğü gibi yarıklardan her seferinde sadece tek bir elektron geçecek kadar seyrek gönderilen

elektronlar ekranda dalgaların oluşturduğu gibi girişim desenini oluşturmaktadır. Bu sonuçlar parçacıkların dalga özelliklerini tekrar teyit ettiği gibi tek bir parçacığın kendi kendisi ile de girişim yapabildiğini ortaya koymaktadır [67].



Şekil 2.7:Schrödinger'in kedisi a) Bir sanatçının Schrödinger'in kedi eleştirisini resmediği [68]. b) Bir SQUID potansiyeli. Soldaki potansiyel çukuru $|0\rangle$ akı durumuna, sağdaki ise $|1\rangle$ akı durumuna karşılık gelmektedir. Girişim aygıtı tünellenebilir bir ekleme yapıldığından ayrık süperpoze durumlar elde edilmektedir [69]

Kuantum mekaniğinin kabullenmesi güç diğer bir önemli özelliği süperpozisyon ya da *üst üste binme ilkesidir*. Schrödinger denkleminin çözümleri kuantum mekaniksel bir fiziksel sistemi temsil etmektedir. Üst üste binme ilkesine göre bu çözümlerin lineer toplamı da Schrödinger denklemini sağlar ve fiziksel sistemi temsil eder [5-9,65,66]. Bu sonuca Schrödinger dalga denklemini bulan Schrödinger bile ikna olmamış ve 1935 yılında yayınladığı makalesinde meşhur kedi örneğini vererek üst üste binme ilkesini eleştirmiştir [10]. Eleştiride verdiği örnek, bozunumu tamamen kuantum mekaniksel reaksiyona bağlı olan bir zehirle aynı kutu içinde bulunan bir kedinin hem canlı hem de ölü durumların toplamı şeklinde bulunması gerektiği ve bunun imkansız olduğu şeklindedir. *Schrödinger'in kedisi* şeklinde ünlenen bu örnek üst üste binme ilkesini çürütemese de kuantum mekaniksel anlayışın klasik görüşle kavranamayacağını anlatan görsel ve çok güzel bir örnek haline gelmiştir. Kedi durumları olarak da bilinen kuantum süperpoze durumları makroskopik ölçekte gözlemlemeye çalışan pek çok çalışma yapılmıştır. Bunların en önemlilerinden biri aynı anda hem saat yönlerinde hem de saat yönlerinin tersi yönünde akım geçirdiği gözlenen süperiletken kuantum girişim aygıtı (SQUID) ile yapılmıştır [69]. Bu deney ayrık kuantum durumlarının süperpozisyon halinin makroskopik ölçekte ilk defa gözlenmesi açısından önemlidir.

2.2.1 Lineer cebir

Lineer cebir, kuantum mekaniğinin anlaşılması için temel matematik öğelerden biridir ve vektör uzayları ve bu uzaylar arası lineer işlemlerle ilgilenir. Lineer cebirin temel objeleri olan vektör uzayları n -katlı karmaşık uzay, \mathbb{C}^n 'de tanımlı (z_1, \dots, z_n) karmaşık sayıdır. Bu vektör uzayların elemanları vektörler olup,

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

şeklinde sütun matrisleriyle temsil edilebilir. Vektörleri temsilen genel gösterim $|\psi\rangle$ şeklindeki dirac gösterimidir. Çizelge 2.3'te çok kullanılan bazı gösterimler listelenmiştir.

Çizelge-2.3: Çok kullanılan bazı kuantum mekaniksel gösterimler

Gösterim	Açıklama
z^*	z karmaşık sayısının kompleks eşleniği
$ \psi\rangle$	Vektör, ket
$\langle\psi $	Dual vektör, bra
$\langle\varphi \psi\rangle$	$ \varphi\rangle$ ve $ \psi\rangle$ vektörlerinin iç çarpımı
$ \varphi\rangle \otimes \psi\rangle$	$ \varphi\rangle$ ve $ \psi\rangle$ vektörlerinin tensör çarpımı
A^*	A matrisinin kompleks eşleniği
A^T	A matrisinin transpozu
A^\dagger	A matrisinin adjointi, $A^\dagger = (A^T)^*$

Bir vektör uzayını geren $|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle$ şeklindeki vektörler kümesi için herhangi bir vektör bu kümenin lineer toplamı olarak

$$|v\rangle = \sum_i a_i |v_i\rangle \quad (2.4)$$

şeklinde yazılabilir. Bu şekilde yazılmış sıfırdan farklı bir vektör kümesi $a_i \neq 0$ olmak üzere;

$$a_1|v_1\rangle + a_2|v_2\rangle + \dots + a_n|v_n\rangle = 0 \quad (2.5)$$

eşitliğini sağlayan a_1, \dots, a_n karmaşık sayıları bulunuyorsa bu küme lineer bağımlıdır, bulunmuyorsa lineer bağımsızdır denilir. Bir vektör uzayındaki lineer bağımsız vektörlerin maksimum sayısı o vektör uzayının boyutunu verir.

2.2.1.a Lineer işlemciler ve matrisler

Bir lineer işlemci herhangi bir V vektör uzayında tanımlı bir vektörü aynı veya farklı bir vektör uzayına taşır. Herhangi bir A işlemcisi,

$$A(\sum_i a_i |v_i\rangle) = \sum_i a_i A(|v_i\rangle) \quad (2.6)$$

ifadesini sağlıyorsa lineer bir işlemcidir ve bu işlemci $A:V \rightarrow V$ şeklinde tanımlıdır. Bu şekilde her vektör uzayında tanımlı bir lineer işlemci birim işlemci $\mathbb{1}$ 'dir ve $\mathbb{1}_v|v\rangle \equiv |v\rangle$ şeklinde tanımlıdır.

Lineer işlemciler matris temsilleriyle çok daha yaygın bir şekilde kullanılmakta ve tanımlanmaktadır. Bunun için vektörlerin iç çarpımı tanımlanmalıdır. İç çarpım, girdi olarak $|v\rangle, |\omega\rangle$ gibi iki vektörü alarak çıktı olarak bir karmaşık sayı veren fonksiyon olarak tanımlanmaktadır. İç çarpım için standart gösterim, $(|v\rangle, |\omega\rangle)$ veya $\langle v|\omega\rangle$ şeklindedir. Burada $\langle v|$ vektörüne Çizelge-2.3'te belirtildiği gibi bra veya $|v\rangle$ vektörüne göre dual vektör denilmektedir. İç çarpımın sırasıyla $\langle v|\sum_i \lambda_i |\omega_i\rangle = \sum_i \lambda_i \langle v|\omega_i\rangle$, $\langle v|\omega\rangle = \langle \omega|v\rangle^*$ ve $\langle v|v\rangle \geq 0$ denklemlerinden görüleceği gibi lineerlik, simetri ve sıfırdan büyük olma özellikleri vardır. Buna göre \mathbb{C}^n uzayında bir iç çarpım,

$$((y_1, \dots, y_n), (z_1, \dots, z_n)) \equiv \sum_i y_i^* z_i = (y_1^* \dots y_n^*) \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

şeklinde tanımlanabilir. İki vektörün iç çarpımı sıfırsa bu iki vektör ortogonal ya da diktir denilir. Bir vektörün kendisiyle iç çarpımının kareköküne ise o vektörün boyu ya da normu denilir. Bir $|v\rangle$ vektörünün normu,

$$\| |v\rangle \| = \sqrt{\langle v|v\rangle} \quad (2.8)$$

şeklindedir. Bir vektörün $|v'\rangle = |v\rangle/\| |v\rangle \|$ şeklinde normuna bölümüne o vektörün *normalize* edilmesi denilir. Normalize bir vektörün boyu $\| |v'\rangle \| = 1$ 'dir ve buna birim vektör denilir. Her biri birim vektör olan $|i\rangle$ şeklindeki bir vektörler kümesindeki her bir vektör $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ şeklinde diğerine dikse bu vektörler kümesi *ortonormal*dir denilir.

Diğer yandan vektörlerin dış çarpım gösterimi de *tamlık bağıntısı* denen yararlı bir aracı ortaya çıkarır. Yine V vektör uzayındaki ortonormal bir baz $|i\rangle$ şeklinde ve bu durumda herhangi bir vektörde,

$$|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle \quad (2.9)$$

şeklinde tanımlansın. Burada $v_i = \langle i|v\rangle$ karmaşık katsayılarıdır.

Buna göre $\sum_i |i\rangle\langle i|$ şeklinde tanımlı bir dış çarpım $|v\rangle$ vektörüne

$$(\sum_i |i\rangle\langle i|)|v\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle = |v\rangle \quad (2.10)$$

şeklinde uygulandığında yine aynı vektörün elde edildiği görülüyor. Bu durumda tüm bazlar üzerinden toplamı alınmış dış çarpım ifadesi,

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = \mathbb{1} \quad (2.11)$$

şeklinde hiçbir şey yapmama işlemine veya birim işlemciye eşit olmalıdır. Son eşitlik tamlık bağıntısı olarak bilinmektedir. Bu bağıntının yararını daha iyi anlamak için $A:V \rightarrow W$ şeklinde tanımlı bir A işlemcisine $A = \mathbb{1}_w A \mathbb{1}_v$ uygulanırsa A işlemcisinin

$$A = \sum_{ij} |\omega_j\rangle\langle \omega_i| A |v_i\rangle\langle v_i| = \sum_i \langle \omega_i| A |v_i\rangle |\omega_j\rangle\langle v_i| \quad (2.12)$$

şeklinde dış çarpım temsili elde edilmiş olur. Burada $|v_i\rangle$ ve $|\omega_j\rangle$ ortonormal bazlardır. Son eşitlikte $\langle \omega_i| A |v_i\rangle$ iç çarpımı, $|v_i\rangle$ ve $|\omega_j\rangle$ bazlarına göre A işlemcisinin i . sütun ve j . satır matris elemanını temsil etmektedir. Bura göre A işlemcisinin V vektör uzayını geren $|v_i\rangle$ vektörleri bazında matris temsili,

$$A = \begin{pmatrix} \langle v_1|A|v_1\rangle & \langle v_1|A|v_2\rangle & \dots & \langle v_1|A|v_n\rangle \\ \langle v_2|A|v_1\rangle & \langle v_2|A|v_2\rangle & \dots & \langle v_2|A|v_n\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle v_n|A|v_1\rangle & \langle v_n|A|v_2\rangle & \dots & \langle v_n|A|v_n\rangle \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

şeklinindedir.

Bir lineer A işlemcisinin özvektörü, a karmaşık bir sayı olmak üzere $A|v\rangle = a|v\rangle$ denklemini sağlayan $|v\rangle$ vektörüdür. Burada a sayısına A işlemcisinin $|v\rangle$ özvektörüne karşılık gelen özdeğeri denilir. İşlemcilerin matris temsillerinden özdeğer ve özvektörler

$$\det|A - \lambda\mathbb{1}| = 0 \quad (2.14)$$

şeklindeki karakteristik denklem çözümlerinden bulunabilir. V vektör uzayında tanımlı bir A işlemcisi için *köşegen temsil* $|i\rangle$, λ_i özdeğerlerine karşılık gelen ortonormal özvektörler seti olmak üzere $A = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$ şeklinde ifade edilir. Eğer bir işlemci köşegen bir temsile sahipse bu işlemci *köşegenleştirilebilir* denilir.

2.2.1.b Özel tanımlı işlemciler, tensör çarpımı, iz

$A: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ 'e tanımlı bir A lineer işlemcisinin adjointi yada hermitik eşleniği A^\dagger ,

$$\langle \omega|A|v\rangle = \langle v|A^\dagger|\omega\rangle^* \quad (2.15)$$

eşitliğini sağlamaktadır. Burada $|v\rangle, |\omega\rangle \in \mathbb{C}^n$ şeklindedir.

Buna göre bir A lineer işlemcisinin matris temsili için $(A^\dagger)_{jk} = A_{kj}^*$ geçerlidir. Diğer bir deyişle bir matrisin adjointi, transpozunun ve elemanlarının karmaşık eşleniğinin alınmasıyla elde edilir. Karmaşık uzayda tanımlı lineer işlemciler için $c \in \mathbb{C}$ olmak üzere $(cA)^\dagger = c^*A^\dagger$, $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$, $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ ve $(A|V\rangle)^* = \langle V|A^\dagger$ eşitlikleri geçerlidir. Bir işlemcinin adjointi,

$$A^\dagger = A \quad (2.16)$$

şeklinde kendisine eşitse *hermitik* bir işlemcidir denilir. Diğer bir özel tanımlı işlemci *normal işlemci*dir. Bir A işlemcisi,

$$AA^\dagger = A^\dagger A \quad (2.17)$$

şartını sağlıyorsa normaldir denilir. Denklem (2.16)'ya göre hermitik işlemcilerin aynı zamanda normal olduğu açıktır. Diğer yandan bir U işlemcisi için,

$$U^\dagger U = \mathbb{1} \quad (2.18)$$

Eşitliği sağlanıyorsa U , birimsel (üniter) bir işlemcidir denilir. Birimsel işlemciler için $UU^\dagger = \mathbb{1}$ eşitliği de geçerlidir. Bu yüzden birimsel işlemciler aynı zamanda normal işlemcilerdir.

Tensör çarpımı vektör uzaylarından daha büyük vektör uzayları elde etmek için kullanılır. Boyutları $m \times n$ ve $p \times q$ olan herhangi iki A, B matrisinin tensör çarpımı $A \otimes B$ olarak gösterilir ve

$$A \otimes B = \left(\begin{array}{cccc} A_{11}B & A_{12}B & \dots & A_{1n}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \dots & A_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{m1}B & A_{m2}B & \dots & A_{mn}B \end{array} \right)^{mp} \quad (2.19)$$

şeklinde $nq \times mp$ boyutlarında bir matris oluşur. Herhangi iki $|i\rangle, |j\rangle$ ortonormal baz vektörü sırasıyla V ve W gibi iki vektör uzayında tanımlı ise $|i\rangle \otimes |j\rangle$ 'de $V \otimes W$ vektör uzayında tanımlıdır. Genellikle $|i\rangle \otimes |j\rangle$ yerine $|i\rangle|j\rangle$ veya $|ij\rangle$ gösterimleri de kullanılmaktadır. Bu bazlar kullanılarak tensör çarpımı ile ilgili bazı özellikler aşağıdaki denklemlerle

$$z(|i\rangle \otimes |j\rangle) = (z|i\rangle) \otimes |j\rangle = |i\rangle \otimes (z|j\rangle) \quad (2.20)$$

$$(|i_1\rangle + |i_2\rangle) \otimes |j\rangle = |i_1\rangle \otimes |j\rangle + |i_2\rangle \otimes |j\rangle \quad (2.21)$$

$$|i\rangle \otimes (|j_1\rangle + |j_2\rangle) = |i\rangle \otimes |j_1\rangle + |i\rangle \otimes |j_2\rangle \quad (2.22)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada z sabit bir sayıdır.

Lineer işlecilerin $V \otimes W$ uzayına etkisi ise

$$(A \otimes B)(|i\rangle \otimes |j\rangle) = A|i\rangle \otimes B|j\rangle \quad (2.23)$$

şeklinde ifade dlebilir. Burada A ve B sırasıyla V ve W vektör uzaylarında tanımlı lineer işlecilerdir. Dięer bir önemli matris özellięi de iz kavramıdır. Bir A matrisinin izi

$$iz(A) \equiv \sum_i A_{ii} \quad (2.24)$$

şeklinde köşegen elemanların toplamıdır. Ayrıca iz özellięinin $iz(AB) = iz(BA)$ ve $iz(A + B) = iz(A) + iz(B)$ şeklinde döngü ve lineer özellikleri de vardır. Yine herhangi iki işlecinin matris temsili için $iz(A \otimes B) = iz(A)iz(B)$ şeklinde yazılabilir. İşlecilerle ilgili dięer bir özellik komütasyon baęıntılarıdır. A ve B gibi iki işlemci arasındaki komütasyon baęıntısı

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.25)$$

şeklinde ifade edilir ve $[A, B] = 0$ ise A ve B işlecileri komüte ediyor denilir. Herhangi iki işlemci komüte ediyorsa bu iki işlecinin de köşegen olduęu bir ortonormal baz bulunmaktadır. Bu durumda bu iki işlemci *aynı anda köşegenleştirilebilir* denilir.

Kuantum hesaplamada son derece yararlı matris temsillerine sahip işleciler spin matrisleri olarak bilinen Pauli matrisleridir. Daha sonraki bölümlerde sıkça kullanılacak olan ve birimsel matrisler olan Pauli matrislerinin gösterimleri ve temsilleri

$$\begin{aligned} \sigma_0 \equiv I &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \sigma_1 \equiv \sigma_x \equiv X &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \sigma_2 \equiv \sigma_y \equiv Y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & \sigma_3 \equiv \sigma_z \equiv Z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.26)$$

şeklinde ifade edilmektedir. Pauli matrisleri komüte etmezler. Pauli matrislerinin sağladıęı komütasyon baęıntılarında bazıları

$$[X, Y] = 2iZ \quad [Y, Z] = 2iX \quad [Z, X] = 2iY \quad (2.27)$$

şeklinindedir. Bu eşitliklerden yola çıkarak Pauli matrislerinin komütasyon baęıntıları daha genel ve uygun biçimde

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \sigma_l \quad (2.28)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ϵ_{jkl} , Levi-civita tensörü olup $\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$ ve $\epsilon_{321} = \epsilon_{213} = \epsilon_{132} = -1$ olup bunların dışındaki durumlar için $\epsilon_{jkl} = 0$ 'dır.

2.2.2 Kuantum mekaniği postulatları

Kuantum mekaniği, teorik olarak ispatlanamayan bir dizi postulat üzerine kurulmuştur. Ampirik olgular üzerine kurgulanan bu postulatlar tüm deneysel çalışmalarla uyum içindedir. Bu çalışmada kuantum mekaniği postulatlarında Kopenhagen yorumu [8] benimsenmiştir. Kuantum mekaniği postulatları aşağıdaki gibi dört maddede toplanmıştır [1].

Postulat-1: Kuantum mekaniğinde izole bir sistem, karmaşık bir vektör uzayı olan Hilbert uzayında (\mathcal{H}) tanımlı normalize bir $|\psi\rangle$ vektörü tarafından temsil edilen bir saf durumla temsil edilir.

Bu postulatla sistemi temsil eden $|\psi\rangle$ vektörünün normalize olması iç çarpım, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ şartını sağladığını söylenmektedir. Diğer yandan $|\psi_1\rangle$ ve $|\psi_2\rangle$ gibi iki vektörün, sistemin iki fiziksel durumu olduğu varsayalım. Buna göre $c_k \in \mathbb{C}$ olmak üzere $c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ durumu da fiziksel sistemin bir durumudur. Daha önce anlatıldığı gibi buna üst üste binme ilkesi denilir.

Postulat-2: Kapalı bir kuantum mekaniksel sistemin zamanla gelişimi, sistemi $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ şeklinde geliştiren bir U birimsel dönüşümü tarafından açıklanır.

Bu postulata alternatif olarak kapalı bir fiziksel sistemin zamanla gelişimini ifade eden Schrödinger denklemi,

$$i\hbar \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = H|\psi\rangle \quad (2.29)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada \hbar Planck sabiti, H (Hamiltoniyen) ise sistemin enerjisiyle ilgili hermitik bir işlemcidir. Denklem (2.29)'un çözümü ile sistemin zamanla gelişimi

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle \quad (2.30)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $|\psi(0)\rangle$ ilk durumdaki vektör, $|\psi(t)\rangle$ ise t süreli gelişimden sonra sistemi temsil eden vektördür.

Postulat-3 Kuantum ölçümleri, $\{M_m\}$ şeklinde tanımlanan ölçüm işlemcileri tarafından belirlenir. Burada m indeksi deneyde ortaya çıkacak ölçüm sonucunu belirtir. Buna göre ölçümden hemen önce sistemi temsil eden vektör $|\psi\rangle$ ve ölçüm sonucu m sonucunun gelme olasılığını $p(m) = \langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle$ olmak üzere sistemin son durumu $\frac{M_m|\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}$ şeklinde ifade edilir. Buradaki ölçüm işlemcileri $\sum_m M_m^\dagger M_m = \mathbb{1}$ şeklinde tamlık bağıntısını sağlamalıdır.

Postulat-4 Pek çok alt sistemden oluşan bir fiziksel sistemin durum uzayı alt sistemlerin durum uzaylarının tensör çarpımı şeklindedir. Buna göre i 'den n 'e kadar indekslenmiş alt sistemler için tüm sistemi temsil eden durum vektörü $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle$ şeklinde ifade edilir.

2.2.3 Yoğunluk matrisi ve kısmi iz

Yoğunluk matrisi yada yoğunluk işlemcisi, kuantum mekaniğinin durum vektörü formülasyonuna alternatif fakat matematiksel olarak özdeş bir formüasyondur. Bir sistemin p_i olasılıklarıyla $|\psi_i\rangle$ durumlarında bulunabileceği düşünülün. Bu durumda saf durumların bir takımları olarak tanımlanabilecek bu sistem için yoğunluk matrisi ifadesi

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (2.31)$$

şekindedir. Yoğunluk matrisinin gelişimini dikkate almak için temsil ettiği sistemin p_i olasılıkla bir $|\psi_i\rangle$ durumunda bulunduğu düşünülün. Bu durumda gelişimin ardından bu durum p_i olasılıkla $U|\psi_i\rangle$ durumunda bulunacaktır.

Böylece yoğunluk matrisinin herhangi bir birimsel işlemci altında gelişimi

$$\rho \xrightarrow{U} \sum_i p_i U|\psi_i\rangle\langle\psi_i| U^\dagger = U\rho U^\dagger \quad (2.32)$$

şeklinde ifade edilir. Kapalı bir kuantum mekaniksel sistemi temsil eden yoğunluk matrisinin zamanla gelişimini elde etmek için (2.29) ve (2.31) denklemleri kullanılarak

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho] \quad (2.33)$$

eşitliği basitçe türetilir. Bu denklem kapalı sistemler için yoğunluk matrisinin zamanla gelişimini açıklayan Liouville-von Neumann eşitliğidir. Öte yandan kompozit bir fiziksel sistem bu sistemi oluşturan alt sistemlerin yoğunluk matrislerinin tensör çarpımları şeklinde ($\rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \dots \otimes \rho_n$) yazılabilir. Yukarıdaki tanımlamalarla birlikte kuantum mekaniği postulatlarının kuantum mekaniği dilinde de yazılabileceği görülmektedir.

Yoğunluk matrisi ile ilgili diğer özellikler şu şekilde sıralanabilir: Yoğunluk matrisi hermitik ve izi $iz(\rho) = 1$ olan bir işlemcidir. Bir kuantum sistem tam olarak bilinen bir $|\psi\rangle$ durumu ile tanımlanabiliyorsa buna saf bir durum denilir. Saf durumlar için yoğunluk matrisi $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ şeklindedir. Eğer sistem sadece bir $|\psi\rangle$ durumu değil de p_i olasılıkla $|\psi_i\rangle$ durumlarıyla temsil ediliyorsa bu durumda sistem saf durumların bir karışımıdır ve karışmış bir durum olarak tanımlanır. Saf durumlar için $iz(\rho^2) = 1$, karışmış durumlar için ise $iz(\rho^2) < 1$ geçerlidir. Ayrıca herhangi bir durum bazında bir A gözlenebilir için beklenen değer ifadesi yoğunluk matrisi teriminde

$$\langle A \rangle = iz(\rho A) \quad (2.34)$$

şeklinde ifade edilir.

Yoğunluk matrisinin en güzel uygulamalarından biri de pek çok alt sistemden oluşan kompozit bir sistemin herhangi bir alt sistemini temsil edebilmesidir. Alt sistemleri temsil eden yoğunluk matrisine *indirgenmiş yoğunluk matrisi* denilmektedir. Sistemin tümünü temsil eden yoğunluk matrisinden alt sistemin yoğunluk matrisine inme işlemine *kısmi iz işlemi* denilir. Örnek vermek gerekirse $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$ şeklinde A ve B gibi iki alt sistemden oluşan bir AB sistemi olsun.

Burada A alt sistemini temsil eden indirgenmiş yoğunluk matrisi B üzerinden alınan kısmi iz işlemi ile

$$\rho_B = iz_A(\rho_A \otimes \rho_B) \quad (2.35)$$

şeklinde bulunur. Daha ayrıntılı şekilde ifade etmek gerekirse $|a_1\rangle$ ve $|a_2\rangle$ A durum uzayının herhangi iki vektörü $|b_1\rangle$ ve $|b_2\rangle$ de B durum uzayının herhangi iki vektörü olmak üzere $\rho_A = |a_1\rangle\langle a_1|$ ve $\rho_B = |b_1\rangle\langle b_1|$ şeklinde tanımlansın. Sistemin yoğunluk matrisi $\rho = \rho_A \otimes \rho_B$ olmak üzere A alt sistemini veren kısmi iz işlemi

$$\rho_A = iz_B(|a_1\rangle\langle a_2| \otimes |b_1\rangle\langle b_2|) = |a_1\rangle\langle a_2| iz(|b_1\rangle\langle b_2|) \quad (2.36)$$

şeklindedir.

2.2.4 Eşevresizlik ve açık kuantum sistemler

Buraya kadar ilgilenilen sistemlerin kapalı veya dış etkilerden yalıtık oldukları varsayıldı. Oysa hiç bir kuantum sistem çevreden tam olarak yalıtık değildir. Çevre (ε) ile etkileşim halinde olan bir kuantum sisteme *açık kuantum sistem*, çevreyle etkileşim sonucu sistemin kuantum bilgisini yitirmesine *eşevresizlik* denilir [1-2,70-71].

Bu durumla ilgili açıklayıcı bir örnek yoğunluk matrisi formülasyonu ile verilebilir. Bu örnek için bir $t = 0$ ilk durumunda saf bir $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ durumu tanımlansın. Burada a ve b karmaşık katsayılar ve $|0\rangle, |1\rangle \in \mathbb{C}^2$ olsun. Bu duruma karşılık gelen yoğunluk matrisi

$$\rho(0) = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \cdot (a^* \quad b^*) = \begin{pmatrix} |a|^2 & ab^* \\ a^*b & |b|^2 \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

şeklinde ifade edilebilir. Belli bir süre sonunda yoğunluk matrisi

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} |a|^2 & e^{-t/\tau} ab^* \\ e^{-t/\tau} a^*b & |b|^2 \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

haline gelir. Burada ' τ ' eşevresizlik süresidir. Eşevresizlik süresi boyunca yoğunluk matrisinin kuantum bilgisini temsil eden köşegen dışı elemanların genliği zamanla giderek azalır. Yeteri kadar süre sonunda ise ($t \gg \tau$) yoğunluk matrisi

$$\rho(\infty) = \begin{pmatrix} |a|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

halini alarak kuantum bilgisi tamamen ve geri dönüşümsüz olarak kaybolmuş olacak ve sistem termodinamik terimlere göre termal dengeye ulaşmış olacaktır.

Bu durumun dinamiğinin daha iyi anlaşılması için tüm sistemi temsil eden yoğunluk matrisi $\rho_{S\varepsilon}$ şeklinde tanımlansın. Burada denklem (2.38)'e benzer şekilde ilgilenilen sistemin t süre sonundaki yoğunluk matrisi çevre üzerinden alınacak bir kısmi iz işlemi ile

$$\rho_S(t) = iz_\varepsilon\{\rho_{S\varepsilon}(t)\} = iz_\varepsilon\{U(t)\rho_{S\varepsilon}(0)U^\dagger(t)\} \quad (2.40)$$

şeklinde bulunur. Burada $U(t)$ tüm sisteme ait zamanla gelişim işlemcisidir.

Denklem (2.43)'teki sistem gelişiminin dinamiği, kapalı kuantum sistemlerin dinamiğini yöneten (2.33) Liouville-von Neumann denkleminin benzer bir denklemlerle

$$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = -i[H'_s, \rho_s(t)] + \mathcal{D}[\rho_s(t)] \quad (2.41)$$

şeklinde açıklanabilir. Bu denkleme *Master denklemler* denilmektedir [70,71]. Burada eşitliğin sağ tarafındaki ilk terim standart Liouville-von Neumann komütatörü olup bu ifadedeki H'_s ise çevre tarafından perturbe edilmiş sistem hamiltonyenidir. Eşitliğin sağ tarafındaki ikinci terim ise eşevresizlik gelişimini temsil etmektedir ve denklemin birimsel olmayan gelişim terimidir.

2.2.5 Kuantum dolanıklık

Kuantum dolanıklık, kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon teorisinin için eşsiz bir kaynaktır [1]. Bir kuantum durumunun dolanık olması 'ayrılabilir' olup olmaması ile yakından ilgilidir. \mathcal{H}_A ve \mathcal{H}_B Hilbert uzayında tanımlı d_A ve d_B boyutlu iki bağımsız kuantum durumu ele alınsın. \mathcal{H}_A uzayında tanımlı durum d_A öz durumlu $|\psi_A\rangle = a_0|0\rangle_A + a_1|1\rangle_A + \dots + a_{d_A-1}|d_A-1\rangle_A$ durumu ve \mathcal{H}_B uzayında tanımlı d_B öz durumlu $|\psi_B\rangle = b_0|0\rangle_B + b_1|1\rangle_B + \dots + a_{d_B-1}|d_B-1\rangle_B$ durumu verilsin. Tüm sistemi tanımlayan durum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ uzayında tanımlıdır. Tüm sistemi tanımlayan durum $|\psi^{AB}\rangle = |\psi^A\rangle \otimes |\psi^B\rangle$ şeklinde yazılabiliyorsa bu durum ayrılabilir bir durumdur ve dolanık bir durum değildir denilir. Tersine $|\psi^{AB}\rangle \neq |\psi^A\rangle \otimes |\psi^B\rangle$ şeklinde ise bu, dolanık bir durumdur denilir. Örnek olarak $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle)$ durumu $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle)$ şeklinde yazılabildiğinden ayrılabilir bir durumdur ve dolanık bir durum değildir. Öte yandan bir $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$ durumu iki farklı uzayın tensör çarpımı şeklinde yazılamadığı için dolanık bir durumdur.

Dolanık durumları ilginç yada garip kılan şey ölçüm işlemi uygulandığında daha iyi anlaşılabilir. Yukarıda örneği verilen dolanık durumda ilk kubitte $M_0 = |0\rangle\langle 0|$ ve $M_1 = |1\rangle\langle 1|$ ölçüm işlemleri uygulansın. Dolanık duruma ait ölçüm uygulanan kubit eşit olasılıkla '0' yada '1' durumuna indirgenecektir. Bu durumda sistemin durumu ise kaçınılmaz olarak ya $|01\rangle$ ya da $|10\rangle$ şekline indirgenmiş olacaktır. Bu sonuca göre ilk kubitin ölçüm sonucu direkt olarak diğer kubitide etkilemektedir sonucu çıkmaktadır. Bu sonucun yerellik ve nedensellik ilkelerine aykırı olduğunu savunan Einstein ve arkadaşları yayımladıkları ve daha sonradan EPR makalesi [11] olarak bilinen makale ile bu sonuca karşı çıkmışlardı. Deneysel sınamalardan [13] başarı ile çıkan dolanıklık günümüzde kuantum teknolojileri için eşsiz bir kaynaktır.

2.3 Kuantum Hesaplama

Kuantum hesaplama (QC) kuantum kaynaklar kullanılarak hesaplama ve bilgi-işlem süreçlerini içerir. Kuantum hesaplama yoluyla çalışan bir bilgisayarın ya da algoritmanın neler yapıp yapamayacağı açık bir soru ve araştırma konusudur. Diğer yandan pratik olarak klasik algoritmaların ve bilgisayarların şu an için başaramadığı çok büyük sayıların polinom sürede çarpanlara ayrılması probleminin Shor algoritmayla yapılabildiğinin ispatlanması [21] kuantum hesaplamanın gücünün umut vaat eden bir örneğini oluşturmaktadır.

2.3.1 Kubitler

Klasik bilginin temel birimi olan '0' ve '1' lerden oluşan bitlere benzer şekilde kuantum hesaplamanın temel bilgi birimi kuantum bit ya da *kubittir*. Bir kubit iki boyutlu Hilbert uzayda tanımlı bir birim vektördür ve

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (2.42)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada a ve b , $|a|^2 + |b|^2 = 1$ şartını sağlayan karmaşık katsayılar, $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ vektörleri ise matris temsilleri

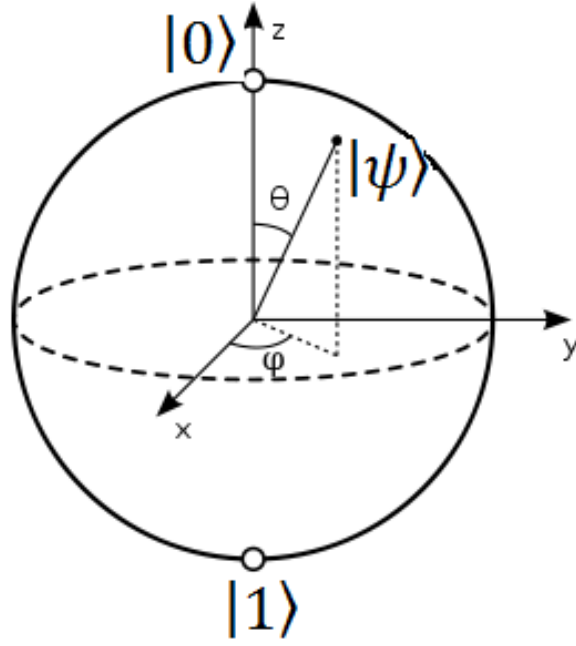
$$|0\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

şeklinde olan, *hesaplama bazı* adı verilen vektörlerdir. Bağntı (2.42)'de görüldüğü gibi kubit, $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ vektörlerinin süperpoze halidir. Bu durumda bir kubit fiziksel olarak herhangi iki kuantum durumunu aynı anda içeren bir fiziksel sistem tarafından temsil edilebilir [1,2,63]. Bir kubit görsel olarak en iyi Bloch küresi ile temsil edilebilir. Bloch küresi temsiline göre herhangi bir kubit, küresinin yüzeyinde ya da içinde bulunan bir noktaya çizilen bir vektörle temsil edilir. Bloch küresi geometrisine göre bir kubit, γ, θ, ϕ reel sayılar olmak üzere

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left(\cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \right) = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

şeklinde ifade edilebilir.

Sırasıyla yükselme ve azimut açıları $0 \leq \theta \leq \pi$ ve $0 \leq \phi \leq 2\pi$ aralığında olup Bloch küresindeki noktanın yerini temsil eder. Bağntı (2.44)'te parantez önündeki $e^{i\gamma}$, global bir faz faktörü olup gözlenebilir bir özelliği yoktur. Parantez içindeki $e^{i\phi}$ ise kubitin, $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ durumları arasındaki bağıl bir faz faktörüdür, gözlenebilir ve kubitlerle ilgili çok değerli bilgiler taşır. Şekil 2.8'de görüldüğü gibi Bloch küresinin kutuplarında $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ baz vektör durumları bulunmaktadır.



Şekil-2.8: Genel bir $|\psi\rangle$ kubit durumunu gösteren Bloch küresi

Öte yandan Bloch küresi yoğunluk matrisi ile de temsil edilebilir. Buna göre Bloch küresinin temsil ettiği bir kubitte karşılık gelen yoğunluk matrisi

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sum_{i=x,y,z} u_i \sigma_i) \quad (2.45)$$

şeklindedir. Burada $\mathbb{1}$ birim matris, genel olarak $|u| < 1$ olmak üzere u_i reel vektör, σ_i ise Pauli matrisleridir. Bağıntı (2.45)'teki ρ işlemcisinin matris temsilinin özdeğerleri

$$\lambda_+ = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{|u|}) \quad \text{ve} \quad \lambda_- = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{|u|}) \quad (2.46)$$

şeklindedir. Yukarıdaki eşitliklere göre $|u| = 1$ için λ_- yok olur böylece yoğunluk matrisinin rankı, $\text{rank}(\rho) = 1$ olur. Bu sonuca göre Bloch küresinin yüzeyindeki noktalar saf durumları belirten vektörlere denk gelmektedir.

2.3.2 Kuantum mantık kapıları

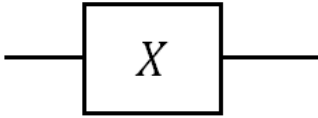
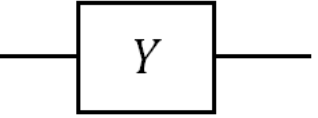
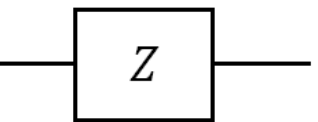
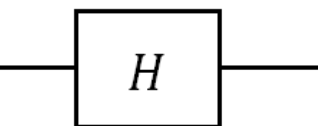
Kubitler üzerine uygulanan birimsel işlemler kuantum mantık kapıları olarak tanımlanabilir. En sık kullanılan mantık kapıları X, Y, Z Pauli işlemcileridir. Bunların dışında Hadamard (H) ve R_k kontrollü faz mantık kapısı

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{ve} \quad R_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/2^k} \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

şeklinde temsil edilebilir.

R_k mantık kapısı için $R_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$ şeklinde ve $R_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/8} \end{pmatrix}$ şeklindedir. Bu durumda R_2 'ye S , faz kapısı, R_3 'e ise T veya $\pi/8$ kapısı denilmektedir. Ayrıca S iki kere uygulandığında Pauli Z 'yi verdiği için buna \sqrt{Z} kapısı da denilir. Bu çalışma kuantum hesaplamada standart devre modelini benimsemiştir. Buna göre bazı tek kubitlik kuantum mantık kapıları, devre temsili ve hesaplama bazlara etkisi Çizelge-2.4'teki gibi derlenmiştir.

Çizelge-2.4:Bazı tek kubitlik kuantum mantık kapıları. Çizelgede matris temsilleri ve hesaplama bazlara etkileri de verilmiştir

Kuantum Mantık Kapısı	Matris Temsili	Hesaplama Bazlara etkisi	
		Giriş	Çıkış
<p><i>Pauli X</i></p> 	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$ 0\rangle$ $ 1\rangle$	$ 1\rangle$ $ 0\rangle$
<p><i>Pauli Y</i></p> 	$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$	$ 0\rangle$ $ 1\rangle$	$i 1\rangle$ $-i 0\rangle$
<p><i>Pauli Z</i></p> 	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$	$ 0\rangle$ $ 1\rangle$	$ 0\rangle$ $- 1\rangle$
<p><i>Hadamard</i></p> 	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$	$ 0\rangle$ $ 1\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (0\rangle + 1\rangle)$ $\frac{1}{\sqrt{2}} (0\rangle - 1\rangle)$

Öte yandan genel olarak tek kubit birimsel dönüleri

$$\hat{R}_n(\theta) = \exp\left(-\frac{i\theta\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}{2}\right) = \cos\frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i\sin\frac{\theta}{2} (n_x X + n_y Y + n_z Z) \quad (2.48)$$

şeklinde yazılabilir. Burada n_x, n_y, n_z üç boyutta reel vektör bileşenleri ve X, Y, Z ise Pauli matrisleridir.

Yukarıdaki bağıntıya göre kubite uygulanabilecek birimsel x, y, z dönüleri ,

$$\begin{aligned}
R_x(\theta) &\equiv e^{-\frac{i\theta X}{2}} = \cos\frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sin\frac{\theta}{2} X = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i \sin\frac{\theta}{2} \\ -i \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
R_y(\theta) &\equiv e^{-\frac{i\theta Y}{2}} = \cos\frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sin\frac{\theta}{2} Y = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i \sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
R_z(\theta) &\equiv e^{-\frac{i\theta Z}{2}} = \cos\frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sin\frac{\theta}{2} Z = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.49}$$

eşitlikleri ile açıklanmış olur. Tek kubitlik bir dönüyü farklı tek kubitlik dönüler ve bir global faz dönüşü cinsinden ayrıştırmak mümkün ve çoğu zaman yararlıdır. Herhangi bir U birimsel dönüşümü için

$$U = e^{i\alpha} R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta) \tag{2.50}$$

denklemini sağlayacak α, β, γ ve δ reel sayıları bulunmaktadır. Bu ifade Z-Y ayrışması olarak bilinmektedir. Buna göre bu birimsel dönüşümün matris temsili

$$U = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha-\beta/2-\delta/2)} \cos\frac{\gamma}{2} & -e^{i(\alpha-\beta/2+\delta/2)} \sin\frac{\gamma}{2} \\ e^{i(\alpha+\beta/2-\delta/2)} \sin\frac{\gamma}{2} & e^{i(\alpha+\beta/2+\delta/2)} \cos\frac{\gamma}{2} \end{pmatrix} \tag{2.51}$$

şeklinde dir.

2.3.2.a Kontrollü mantık kapıları

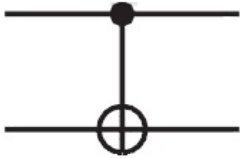
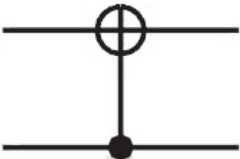
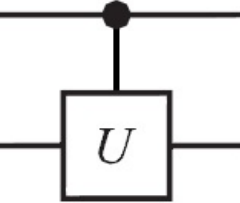
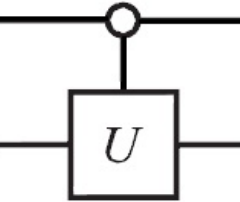
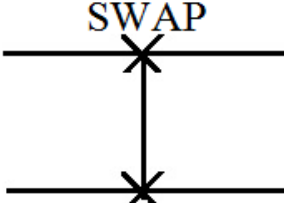
Sistemler tek kubitten daha büyük boyutlarda vektör uzayı gerektirebilir. İki kubit durumunda $2^n = 2^2 = 4$ boyutlu Hilbert uzayı ve karşılık gelen baz vektörleri, tek kubitlik baz vektörlerin tensör çarpımı ile

$$\{|0\rangle, |1\rangle\} \otimes \{|0\rangle, |1\rangle\} = \{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\} \tag{2.52}$$

şeklinde elde edilebilir. Çok kubitlik sistemlerde tek kubitlik mantık kapıları da işlem yapabilir. Örnek olarak iki kubitlik bir sisteme bir U tek kubitlik bir mantık kapısı $U \otimes \mathbb{1}$ veya $\mathbb{1} \otimes U$ şeklinde uygulanabilir. Burada $\mathbb{1}$, 2×2 boyutunda birim matristir.

Bir kubitin durumunu diğer bir kubitin durumuna göre değiştiren işlemciler kontrollü işlemciler bu işlemleri uygulayan mantık kapılarına ise kontrollü mantık kapıları denilmektedir. Kontrollü mantık kapılarının uygulandığı kubitlerden diğerinin durumuna göre durumunu değiştiren kubite hedef kubit, diğer kubit ise kontrol kubit olarak tanımlanır. En önemli kontrollü işlemci Kontrol-DEĞİL, ($CNOT$) işlemcisidir. $CNOT$ mantık kapısının kubitlere etkisi kubitlerin ikili toplamı (mod2) şeklinde tanımlanabilir. Bazı kontrollü ve 2 kubitlik mantık kapıları Çizelge-2.5'teki gibi derlenmiştir.

Çizelge-2.5:Bazı iki kubitlik kuantum mantık kapıları. Çizelgede mantık kapılarına ait devre sembolleri, matris temsilleri ve hesaplama bazlara etkileri de verilmiştir

Kuantum Mantık Kapısı	Matris Temsili	Hesaplama Bazlara etkisi	
		Giriş	Çıkış
$CNOT_a$ 	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$ 00\rangle$ $ 01\rangle$ $ 10\rangle$ $ 11\rangle$	$ 00\rangle$ $ 01\rangle$ $ 11\rangle$ $ 10\rangle$
$CNOT_b$ 	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$ 00\rangle$ $ 01\rangle$ $ 10\rangle$ $ 11\rangle$	$ 00\rangle$ $ 11\rangle$ $ 10\rangle$ $ 01\rangle$
$C-U$ 	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_{11} & u_{12} \\ 0 & 0 & u_{21} & u_{22} \end{bmatrix}$	$ 00\rangle$ $ 01\rangle$ $ 10\rangle$ $ 11\rangle$	$ 00\rangle$ $ 01\rangle$ $ 1\rangle U 0\rangle$ $ 1\rangle U 1\rangle$
C^o-U 	$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & 0 & 0 \\ u_{21} & u_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$ 00\rangle$ $ 01\rangle$ $ 10\rangle$ $ 11\rangle$	$ 0\rangle U 0\rangle$ $ 0\rangle U 1\rangle$ $ 10\rangle$ $ 11\rangle$
SWAP 	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$ 00\rangle$ $ 01\rangle$ $ 10\rangle$ $ 11\rangle$	$ 00\rangle$ $ 10\rangle$ $ 01\rangle$ $ 11\rangle$

İkili toplam \oplus şeklinde ifade edilmek üzere CNOT mantık kapısının kubitlere etkisi

$$CNOT_a|a, b\rangle = |a, a\oplus b\rangle \quad \text{ve} \quad CNOT_b|a, b\rangle = |a\oplus b, b\rangle \quad (2.53)$$

şeklinde dir.

Öte yandan iki kubitlik genel bir Kontrol- U işlemcisinin ($C - U$), ilk kubit kontrol kubit olmak üzere iki kubitlik hesaplama bazlarına etkisi

$$(C - U)|0b\rangle = |0b\rangle \quad \text{ve} \quad (C - U)|1b\rangle = |1\rangle U|b\rangle \quad (2.54)$$

şeklindedir. Burada $b \in \{0,1\}$ ve U tek kubitlik kuantum mantık kapısıdır. Çizelge-2.5'in 4. Satırında bulunan terslenmiş kontrol nodu, hedef kubit $|0\rangle$ ise kontrol kubite U işlemcisinin uygulanacağını belirtmektedir. Ayrıca $SWAP$ mantık kapısı iki kubitlik durumları kendi aralarında değiş tokuş etmektedir.

Kontrollü mantık kapıları için uygun bir ayrıştırma

$$C - U = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes U \quad (2.55)$$

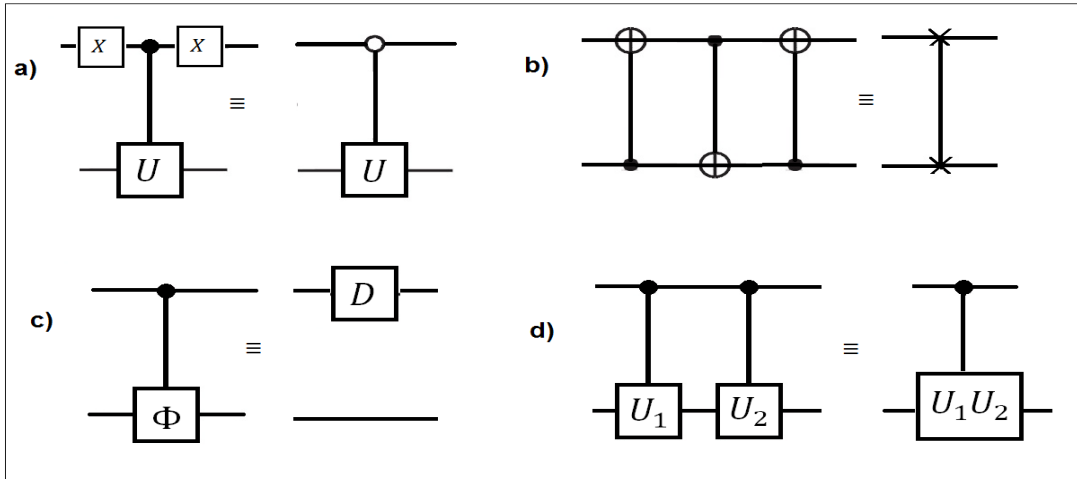
şeklinde yazılabilir. Burada $\mathbb{1}$, 2×2 boyutunda birim matristir. Terslenmiş kontrol nodlu mantık kapısı için bu ifade $C^0 - U = |0\rangle\langle 0| \otimes U + |1\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1}$ şeklindedir. Bu ifade, eşitlik (2.55)'e benzetilerek

$$C^0 - U = |0\rangle\langle 0| \otimes U + |1\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} = (X|1\rangle\langle 1|X) \otimes U + (X|0\rangle\langle 0|X) \otimes \mathbb{1} \quad (2.56)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu durumda en son ifade

$$C^0 - U = (X \otimes \mathbb{1}) \underbrace{(|0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes U)}_{C-U} (X \otimes \mathbb{1}) \quad (2.57)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifadeye göre $C - U$ işlemcisi kontrol kubite uygulanacak X işlemcileri sonucu $C^0 - U$ işlemcisi ile özdeş hale gelmektedir. Ayrıca $CNOT$ mantık kapılarının peş peşe çeşitli şekillerde uygulanması ile $SWAP$ mantık kapısı elde edilmektedir. Bu ve diğer matris özdeşlikleri Şekil-2.7'de verilmiştir.

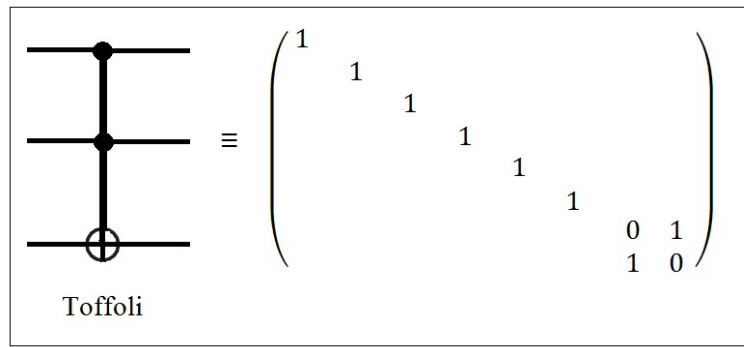


Şekil-2.9:İki kubitlik çeşitli matris özdeşlikleri ve devre sembolleri. a) Kontrollü bir işlemci, uygulanan tek kubitlik X kapıları ile terslenmiş kontrol nodlu işlemciye özdeş hale gelir. b) 3 tane $CNOT$ kapısı farklı kontrol şekillerinde uygulanarak $SWAP$ kapısı elde edilir. c) Kontrollü bir faz kapısı tek kubitlik bir kapıya özdeştir. Burada $D = |0\rangle\langle 0| + e^{i\phi}|1\rangle\langle 1|$ formdadır. d) Ardışık kontrollü işlemciler tek bir kontrollü işlemciye özdeştir.

Klasik kapılarda olduğu gibi kuantum hesaplamada da evrensel mantık kapılarından söz edilebilir. Barenco ve Di Vincenzo'nun çalışmaları kuantum hesaplamada tüm mantık kapılarının tek kubitlik ve *CNOT* mantık kapılarından elde edilebileceğini göstermektedir [72-73].

2.3.2.b Çoklu kontrollü mantık kapıları

Gerektiğinde daha çok kontrol nodlu mantık kapıları daha büyük bir Hilbert uzayı ile kullanılır. Çoklu kontrollü mantık kapıları genel olarak $C^n - U$ şeklinde gösterilir. Örneğin $n = 2$ ve $U = X$ için oluşan mantık kapısı *CCNOT* yada Toffoli mantık kapısı olarak bilinir. Bu mantık kapısının devre sembolü ve matris temsili Şekil-2.10'da gösterilmiştir.

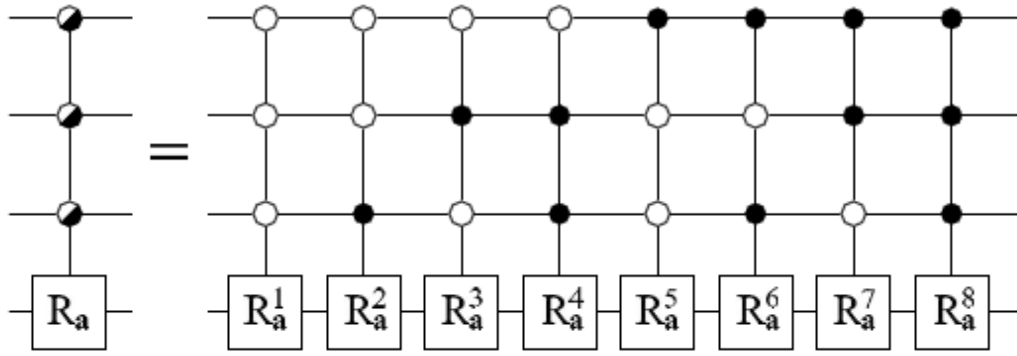


Şekil-2.10: Toffoli mantık kapısı. Toffoli devre sembolü ve matris temsili. Toffoli mantık kapısının iki kontrol nodu bulunmakta ve 8x8'lik matrisle temsil edilmektedir.

Öte yandan matris temsillerinde sadece köşegen elemanlar içeren mantık kapıları terslenmiş kontrol nodlarını da içeren çoklu kontrollü mantık kapıları ile yürütülebilir. Bu amaca yönelik *düzgün kontrollü mantık kapısı* [74] literatüre girmiştir. Bir düzgün kontrollü $F_m^k(R_a)$ işleminin matris temsili

$$F_m^k(R_a) = \begin{pmatrix} R_a(\alpha_1) & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & R_a(\alpha_{2k}) \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

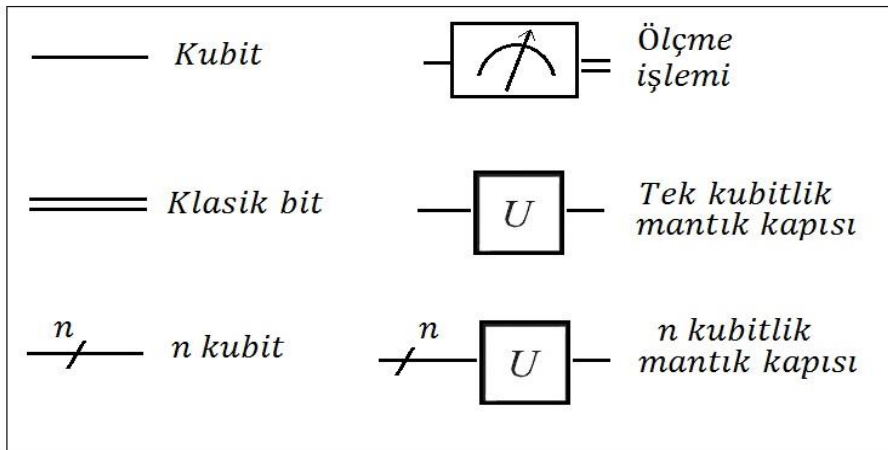
şeklinde. Burada k kontrollü nod sayısı, m ise kubit sayısı, R_a ise eşitlik (2.48)'de verilen herhangi bir birimsel kubit dönüşüdür. Şekil-2.11'de düzgün kontrollü bir mantık kapısı görülmektedir. Şekil 2.11'de görülen terslenmiş kontrol nodları eşitlik (2.57) kullanılarak özdeş kontrol nodlarına dönüştürülebilir.



Şekil-2.11:Düzgün kontrollü $R_4^3(R_a)$ mantık kapısının devre sembolü. $k = 3$ ve $m = 4$ için $R_4^3(R_a)$ mantık kapısının devre sembolü ve devre özdeşi devrenin matris temsili 16×16 boyutunda bir matrisle temsil edilmekte ve devreyi temsil eden matris, denklem (2.58)'deki gibi blok köşegen elemanlar içermektedir [74]

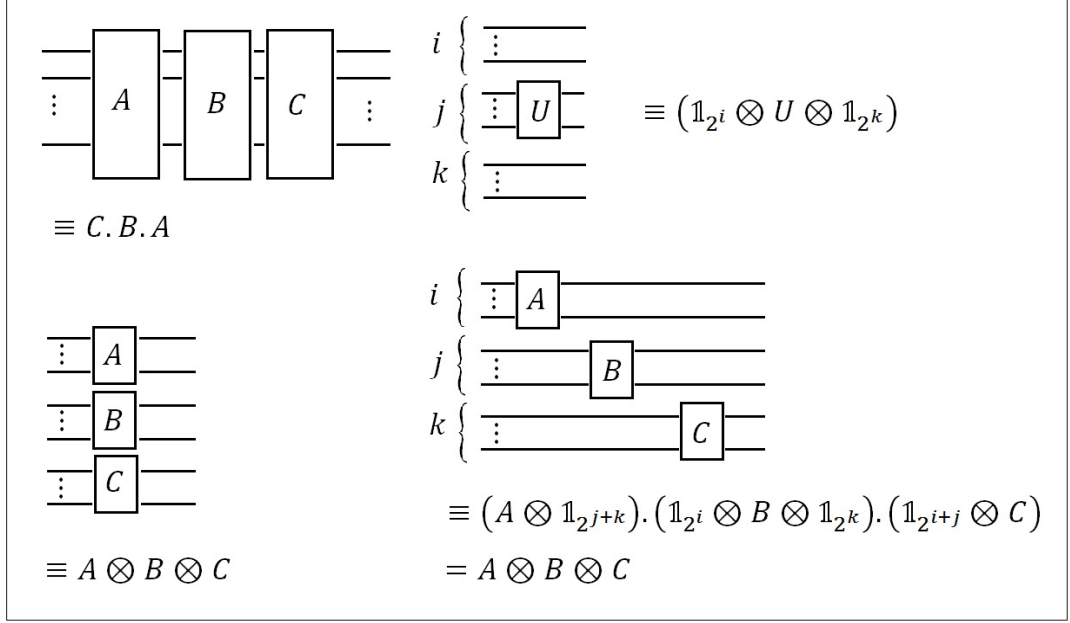
2.3.3 Kuantum devreler ve algoritmalar

Kuantum devreler, çok kubitlik kuantum hesaplamamın 1 ve 2 kubitlik kuantum mantık kapılarıyla daha basit şekli ayrıştırılmış basamaklarını görselleştirir. Kuantum devreleri oluşturan elemanların bazıları Çizelge-2.5 ve Şekil-2.9'da verilmişti. Bunlara ek olarak diğer devre elemanları ve devre sembolleri Şekil-2.12'de verilmiştir.



Şekil-2.12 :Kuantum algoritmaları oluşturan elemanların devre sembolleri

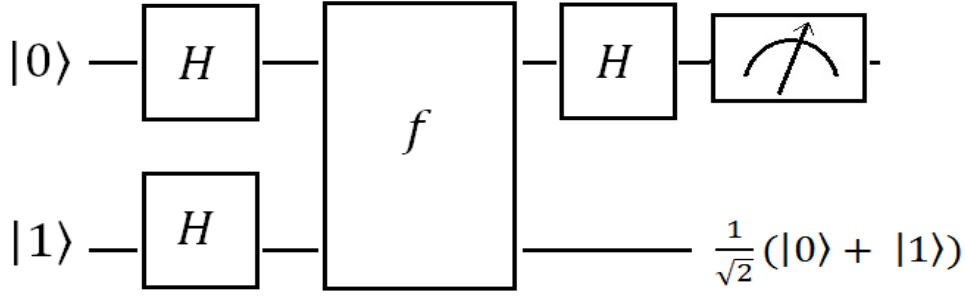
Kuantum devrelerinde zaman soldan sağa akar. Devredeki her bir yatay çizgi kubitleri, çift yatay çizgiler ise klasik bitleri temsil etmektedir. Kuantum devresindeki her bir tek kubitlik birimsel işlemcinin 2×2 'lik, n kubitlik birimsel işlemci ise $2^n \times 2^n$ 'lik matris temsiline sahiptir. Çok kubitlik birimsel işlemcilerin ard arda uygulanmasıyla elde edilen işlemcinin matris temsili, bu işlemcilerin ayrı ayrı matris temsillerinin çarpımına eşittir. Çok kubitli bir sistemde ise tek veya çok kubitli birimsel işlemcilerin paralel uygulanması bu mantık kapılarının tensör çarpımları ile ifade edilir. Bazı kuantum devreler ve karşılık gelen işlemciler Şekil-2.13'teki gibi derlenmiştir.



Şekil-2.13:Kuantum devre parçaları ve karşılık gelen matris temsilleri. Kuantum devrelerin matris temsilleri elde edilirken normal matris çarpımı ve tensör çarpımı kullanılmaktadır.

Kuantum devrelerin matris temsilleri bulunurken kömüte etmeyen işlemciler için çarpım sırası önemlidir. Kömüte eden işlemciler ise herhangi bir sırada çarpılabilirler. Kuantum hesaplama için geliştirilen kuantum algoritmalar yukarıda açıklanan devrelerle görselleştirilir. Günümüze kadar yayınlanmış kuantum algoritma sayısı birkaç taneden fazla olmamakla beraber pek yakında çok sayıda yeni algoritmanın gelmesi de beklenmemektedir. Bunun nedenlerinden biri herhangi bir kuantum algoritmanın benzer işi yapan bir klasik algoritmadan çok daha ‘verimli’ olması gereğidir. Diğer neden ise klasik sezgi anlayışına alışmış tasarımcıların tamamen kuantum düşünce ile algoritma üretmelerindeki güçlüktür.

Bir kuantum algoritma ile klasik benzerini kıyaslamamanın en iyi yolu daha önceki kesimlerde değinilen karmaşıklık analizidir. Geleneksel hesaplama karmaşıklığı anlayışına göre n boyutlu bir sistem için problemin ölçeği eksponansiyel $\mathcal{O}(k^n)$ olarak artıyorsa problem ‘güç’, problemin ölçeni polinomal $\mathcal{O}(k^n)$ olarak artıyorsa problem ‘kolay’ olarak adlandırılır. Shor algoritmasıyla klasik olarak polinomal sürede çözümü bilinmeyen büyük sayıların çarpanlara ayrılması probleminin kuantum algoritmalarınca çözülebildiğini göstermesi [21] büyük ilgi uyandırmıştır. Diğer bir örnek olarak ise Grover’in sıralanmamış bir listede arama algoritması gösterilebilir [23]. Burada klasik algoritmaların N adımda yaptığı arama işini söz konusu kuantum algoritma \sqrt{N} adımda yapmaktadır. Deutsch algoritması ilk kuantum algoritması olup ilk kez kuantum Turing makinesi QTM’den bahsetmiştir. Kuantum algoritmaların örneklendirilmesi özelliklerinin sergilenmesi açısından Deutsch algoritması hem ilk olması hem de sadeliği açısından çok güzel bir örnektir. Deutsch algoritmasına ait kuantum devresi Şekil-2.14’te verilmiştir.



Şekil-2.14: Deutsch algoritması kuantum devre şeması. Kara kutu olarak adlandırılan f fonksiyonu girdi olarak verilen x bitini ‘0’ yada ‘1’ olarak çıktı vermekte çıktılar aynı ise fonksiyon sabit, farklı ise dengeli olarak tanımlanmaktadır.

Deutsch algoritması bir $f(x)$ fonksiyonunun sabit ya da dengeli olup olmadığını bulan bir karar problemi ile ilgilidir. f fonksiyonu için $f(0) = f(1)$ ise karar sabit, $f(0) \neq f(1)$ ise karar dengeli şeklinde olmalıdır. Burada x ikili sayı sisteminde n bitlik bir sayı, $f(x)$ ise x sayısından tek bitlik bir çıktı veren bir fonksiyondur. Burada f fonksiyonunun yapısından çok, verdiği sonuçla ilgilenildiğinden bu fonksiyon bir ‘kara kutu’ olarak tanımlanmaktadır. Burada kara kutu

$$|x\rangle|y\rangle \rightarrow |x\rangle|y \oplus f(x)\rangle \quad (2.59)$$

işlemine sağlamak ve en az iki kubitlik kuantum hafıza gerektirmektedir. Klasik bilgisayarlar bu tip karar problemlerini sonuçlandırmak için önce $f(0)$, sonra $f(1)$ ’i hesaplayıp eşit olup olmadığını kontrol ederler. Bu durumda karar problemi iki adım gerektirmektedir. Aşağıda ise Deutsch algoritmasındaki durum tartışılmaktadır.

Eşitlik (2.59)’daki f fonksiyonu Şekil-2.14’de olduğu gibi her iki kubitte H kapısı bulunan Deutsch algoritmasına uygulandığında sistemin durumu

$$|x\rangle(|0\rangle + |1\rangle) \xrightarrow{f} |x\rangle(|0 \oplus f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle) \quad (2.60)$$

şekline gelecektir. Burada normalizasyon faktörleri ihmal edilmiştir. Farklı x değerlerine karşı olası $f(x)$ değerleri ve bu sonuçlarla oluşan durum Çizelge-2.6’da verilmiştir.

Çizelge-2.6: Deutsch algoritmasında olası x ve $f(x)$ değerleri. Çizelgede sistemde bu değerlere karşılık gelen kuantum durumları da verilmiştir

x	$f(x)$	$ x\rangle(0 \oplus f(x)\rangle - 1 \oplus f(x)\rangle)$
0	0	$ 0\rangle(0\rangle - 1\rangle)$
0	1	$ 0\rangle(1\rangle - 0\rangle)$
1	0	$ 1\rangle(0\rangle - 1\rangle)$
1	1	$ 1\rangle(1\rangle - 0\rangle)$

Çizelge-2.6'daki sonuçlara göre $f(x)$ fonksiyonu kuantum durumuna

$$|x\rangle(|0\rangle - |1\rangle) \xrightarrow{f} (-1)^{f(x)}|x\rangle(|0\rangle - |1\rangle) \quad (2.61)$$

şeklinde etki etmektedir. Bu tanımlamalarla Şekil-2.14'teki Deutsch algoritmasının adımları aşağıdaki gibi açıklanabilir. İlk kuantum durumu $|01\rangle$ şeklindedir ve iki kubitte de uygulanan H işlemlerinden sonra sistem,

$$|01\rangle \xrightarrow{H \otimes H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (2.62)$$

şeklini alır. Bundan sonra uygulanan iki kubitlik f fonksiyonu sonrası sistem

$$\xrightarrow{f} \frac{1}{\sqrt{2}}((-1)^{f(0)}|0\rangle + (-1)^{f(1)}|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (2.63)$$

haline gelir. Algoritmada belirtildiği gibi tüm bu adımlardan sonra son olarak ilk kubitte uygulanan H işleminin ardından sistemin en son durumu

$$\begin{aligned} &\xrightarrow{H \otimes 1} \left[\left(\frac{1}{2}(-1)^{f(0)} + \frac{1}{2}(-1)^{f(1)} \right) |0\rangle \right. \\ &\left. + \left(\frac{1}{2}(-1)^{f(0)} - \frac{1}{2}(-1)^{f(1)} \right) |1\rangle \right] \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned} \quad (2.64)$$

elde edilir. Bu ifadeye göre eğer f fonksiyonu sabitse yani $f(0) = f(1)$ ise ilk kubit $|0\rangle$ durumunda bulunacak, f fonksiyonu dengeli ise yani $f(0) \neq f(1)$ ise ilk kubit $|1\rangle$ durumunda ölçülecektir. Bu sonuca göre bu kuantum algoritma ile $f(x)$ fonksiyonunun dengeli ya da sabit olduğuna tek adımda karar verilmektedir. Bu durum klasik algoritmalara göre açık bir hız artışı sağlamakta ve bu durumu mümkün kılan şey kuantum algoritmalarda mümkün olan süperpozisyon ilkesidir. Kuantum hesaplamada buna *kuantum paralelliği* denilmektedir.

2.3.3.a Kuantum Fourier dönüşüm algoritması

Fourier dönüşüm, matematik, fizik ve mühendislikte sinyal analizinde sıkça kullanılan bir alettir. N tane $(x_0, x_1, \dots, x_{N-1})$ şeklinde data noktasından oluşan bir küme bulunduğu varsayalım. Bu noktaların ayrık fourier dönüşümünden oluşan bir küme

$$(x_0, x_1, \dots, x_{N-1}) \rightarrow (y_0, y_1, \dots, y_{N-1}) \quad (2.65)$$

şeklindedir. Burada dönüşmüş her bir nokta :

$$y_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi jk/N} x_k \quad (2.66)$$

şeklinde tanımlanmaktadır [75].

Bu tanımlama, ayrık noktalar yerine sürekli bir $f(x)$ fonksiyonuna genellenebilir. Böylece bu $f(x)$ fonksiyonu N değer üzerinden

$$f(x) \rightarrow (f(0), f(1), \dots, f(N-1)) \equiv f_N \quad (2.67)$$

şeklinde ayrıştırılabilir. Böylece $f(x)$ fonksiyonunun Fourier dönüşümü

$$\hat{f}(y) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} e^{i2\pi xy/N} f(x) \quad (2.68)$$

şeklinde tanımlanır.

Şimdi ise Hilbert uzayında tanımlı $N = 2^n$ tane hesaplama baz , $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle$ şeklinde tanımlansın. O halde hesaplama bazların kuantum Fourier dönüşümü ayrık Fourier dönüşüme benzer şekilde

$$QFT|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi jk/N} |k\rangle \quad (2.69)$$

şeklinde tanımlanabilir. Burada j ve k ikili sayı sisteminde tam sayılardır ve

$$J = j_1 j_2 \dots j_n = j_1 2^{n-1} + j_2 2^{n-2} + \dots + j_n 2^0 = \sum_{i=1}^n j_i 2^{n-i} \quad (2.70)$$

şeklinindedir. Eşitlik (2.69) da üstel ifadedeki k yerine eşitlik (2.70) deki eşiti konulursa

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi j \sum_{l=1}^n k_l 2^{n-l} / 2^n} |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i j \sum_{l=1}^n k_l 2^{-l}} |k\rangle \quad (2.71)$$

elde edilir. Üstel ifadedeki toplam , tabanların çarpımı olarak

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i j k_1 2^{-1}} \times e^{2\pi i j k_2 2^{-2}} \times \dots \times e^{2\pi i j k_n 2^{-n}} |k\rangle \quad (2.72)$$

şeklinde yazılabilir. Son eşitlikteki toplam k üzerinden ($k = 0,1$) ayrıştırılarak çarpım şeklinde yazılırsa

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \dots \sum_{k_{n-1}=0}^1 e^{2\pi i j k_1 2^{-1}} \times e^{2\pi i j k_2 2^{-2}} \times \dots \times e^{2\pi i j k_n 2^{-n}} |k_1 k_2 \dots k_{n-1}\rangle \quad (2.73)$$

elde edilir. Bu durumda dönüşüm ,

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|0\rangle + e^{2\pi i j 2^{-1}} |1\rangle) (|0\rangle + e^{2\pi i j 2^{-2}} |1\rangle) \dots (|0\rangle + e^{2\pi i j 2^{-n}} |1\rangle) \quad (2.74)$$

şeklini almış olur. Eşitlik (2.70)'de açıklanan ikili sayı sistemindeki J 'nin tanımı

$$0.j_1 j_2 \dots j_n = \frac{j_1}{2} + \frac{j_2}{2^2} + \dots + \frac{j_n}{2^n} \quad (2.75)$$

şeklinde yazılabileceğinden kuantum Fourier dönüşüm,

$$QFT|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_n} |1\rangle) (|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_{n-1} j_n} |1\rangle) \dots (|0\rangle + e^{2\pi i j_1 j_2 \dots j_n} |1\rangle) \quad (2.76)$$

şeklinde yazılmış olur.

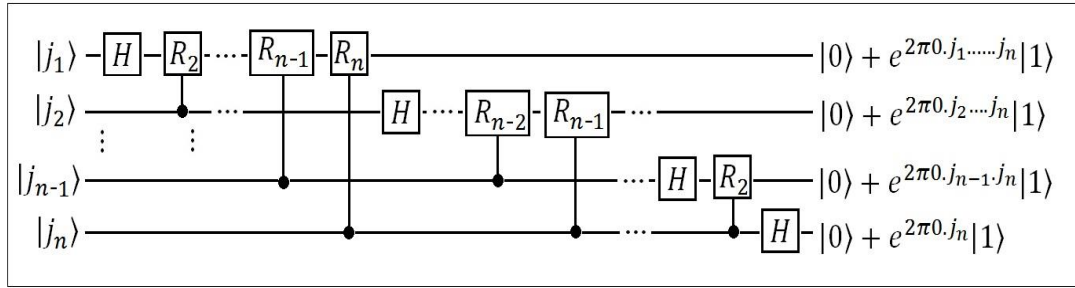
QFT'nin kubitler üzerindeki etkisini son eşitlikteki gibi ardışık çarpım şeklinde yazmak ilgili kuantum algoritmayı kurmak açısından önemlidir. Bu dönüşümü gerçekleştirmek için gerekli iki mantık kapısı, matris temsilleri eşitlik (2.47)'de verilmiş Hadamard dönüşüm H ve R_k mantık kapılarıdır. Hadamard dönüşümün kubitlere etkisi Çizelge 2.4'te verilmişti. Bu sonuç başka bir ifadeyle

$$H|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_y (-1)^{xy} |y\rangle \quad (2.77)$$

şeklinde de yazılabilir. Öte yandan R_k 'nın hesaplama bazlara etkisi etkisi ;

$$R_k|0\rangle = |0\rangle \quad \text{ve} \quad R_k|1\rangle = e^{i2\pi/2^k} |1\rangle \quad (2.78)$$

şeklinindedir. Kuantum fourier dönüşümün uygun bir kuantum devre temsili Şekil-2.2'deki gibidir.

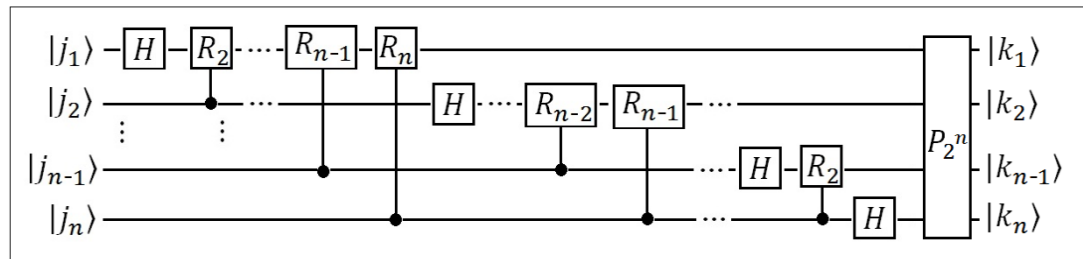


Şekil-2.15: Bir n kubitlik QFT devresi. Her bir yatay çizgi kubitleri temsil etmektedir ve devre Hadamard ve kontrollü R_k kapılarından oluşmaktadır

Fakat Şekil-2.15'teki devre uygulandığında

$$|0 \cdot j_1 j_2 \dots j_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|0\rangle + e^{2\pi i j_1 j_2 \dots j_n} |1\rangle) \cdot (|0\rangle + e^{2\pi i j_2 \dots j_n} |1\rangle) \dots \dots (|0\rangle + e^{2\pi i j_n} |1\rangle) \quad (2.79)$$

elde edilir. Bu sonuç elde edilmesi gereken sonuç olan eşitlik (26)'nın tam tersidir. Bunu düzeltmek için algoritmanın sonunda Şekil-2.16'teki gibi SWAP ya da permütasyon kapıları kullanılabilir.



Şekil-2.16: Permütasyon işlemcili QFT devresi. N kubit QFT algoritmasının sonunda P^{2^n} permütasyon işlemcisi kubit durumlarına $P^{2^n} |k_n k_{n-1} \dots k_1\rangle = |k_1 k_2 \dots k_n\rangle$ şeklinde etki etmektedir

Kuantum Fourier dönüşüm, n kubit için $\frac{n(n+1)}{2}$ tane mantık kapısı gerektirmektedir. Bu durum mantık kapısı sayısının $\mathcal{O}(n^2)$ mertebesinde arttığını göstermektedir. Oysa klasik Fourier dönüşümde bu sayı $\mathcal{O}((2^n)^2)$ şeklindedir. Ayrıca QFT'yi oluşturan tüm mantık kapıları birimsel olduğundan QFT işlemi de birimsel bir işlemcidir.

2.3.3.b Kuantum faz tahmin algoritması

Pek çok kuantum mekaniksel hesaplama örneği özdeğerlerin bulunmasını gerektirir. Kuantum hesaplama, 'faz tahmini' denen metotla özdeğer tahminini mümkün kılmaktadır. Herhangi bir \mathcal{H} hamiltoniyenine ve $|\psi_\lambda\rangle$ öz durumuna sahip bir sistem için $|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle$ yazılabilir. Burada λ , karşılık gelen özdeğerdir. Bu özdeğeri kuantum algoritma ile bulmak için karşılık gelen kuantum devrelerin kurulabileceği birimsel işlemcileri oluşturmak gerekmektedir.

Burada \mathcal{H} hamiltoniyenine karşılık gelen birimsel işlemci denklem (2.30)'da verilmiş olan $U = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$ işlemcisidir. Burada $t = 1$ ve $\hbar = 1$ için $U = e^{-i\mathcal{H}}$ işlemcisine karşılık gelecek özdeğer $e^{-i\lambda}$ olacaktır. Benzer şekilde $e^{+i\mathcal{H}}|\psi_\lambda\rangle = e^{+i\lambda}|\psi_\lambda\rangle$ denklemini mümkün kılacak bir kuantum devresiyle λ 'nın bulunması faz tahmin algoritmasının ana ilkesini oluşturmaktadır. λ özdeğerinin elde edilmesi için oluşturulması gereken kuantum durumu

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} e^{i\lambda y} |y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} e^{2\pi i \varphi y} |y\rangle \quad (2.80)$$

formunda olmalıdır. Burada özdeğer $\lambda = 2\pi\varphi$ şeklindedir. Bu durumda φ 'yi ikili sayı sisteminde ve $0 \leq \varphi \leq 1$ olacak şekilde seçmek uygundur. Böylece $\varphi = 0.x_1x_2x_3\dots$ ($x_i \in 0,1$) şeklinde ve sistemin kuantum durumu

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} e^{2\pi i \varphi y} |y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} e^{2\pi i (0.x_1x_2x_3\dots)y} |y\rangle \quad (2.81)$$

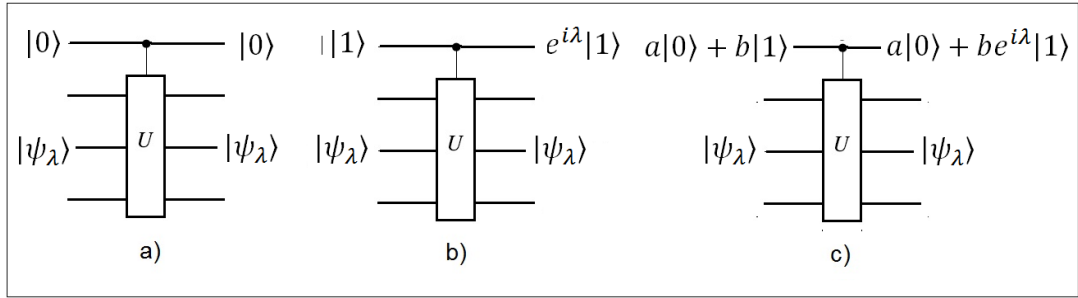
şeklinde olur. Bu durumun QFT ile elde edilebileceği açıktır. İkili sayı sistemindeki $\varphi = 0.x_1x_2x_3\dots$ için her iki tarafı 2 ve kuvvetleriyle çarpmak $2^1\varphi = x_1.x_2x_3\dots$, $2^2\varphi = x_1x_2.x_3\dots$ şeklinde kesir kısmını bir basamak kaydırmaya karşılık gelir. Bu durumda ifadeler

$$\begin{aligned} e^{2\pi i \varphi} &= e^{2\pi i 0.x_1x_2x_3x_4\dots} = e^{2\pi i 0.x_1x_2x_3} \\ e^{2\pi i 2^1\varphi} &= e^{2\pi i x_1.x_2x_3x_4\dots} = \underbrace{e^{2\pi i x_1}}_1 e^{2\pi i 0.x_2x_3} \\ e^{2\pi i 2^2\varphi} &= e^{2\pi i x_1x_2.x_3x_4\dots} = \underbrace{e^{2\pi i x_1x_2}}_1 e^{2\pi i 0.x_3x_4} \\ &\vdots \\ e^{2\pi i 2^{(j-1)}\varphi} &= e^{2\pi i x_1x_2.x_3x_4\dots x_{j+1}} = \underbrace{e^{2\pi i x_1x_2.x_3x_4\dots x_{j-1}}}_1 e^{2\pi i 0.x_jx_{j+1}} \end{aligned} \quad (2.82)$$

şeklinde yazılabilir. Son eşitliklerde görüldüğü gibi ($x_i \in 0,1$) için $e^{2\pi i x_i} = 1$ olduğundan üstel ifadeler

$$\begin{aligned}
 e^{2\pi i \varphi} &= e^{2\pi i 0.x_1 x_2 x_3 x_4} \\
 e^{2\pi i 2^1 \varphi} &= e^{2\pi i 0.x_2 x_3 x_4} \\
 &\vdots \\
 e^{2\pi i 2^{(j-1)} \varphi} &= e^{2\pi i 0.x_j x_{j+1}}
 \end{aligned} \tag{2.83}$$

şeklinde yazılmaktadır. Buna göre üstel ifade 2'nin her kuvvetiyle çarpıldığında φ 'nin basamakları elde edilebilir. Bunun yapılabilmesi için U işlemcisinin U^{2^k} şeklinde kuvvetlerinin uygulanması gerektiği anlaşılmaktadır. İlgili algoritmanın açıklanmasından önce faz tahminini mümkün kılacak 'özdeğer tepmesi' kavramının açıklanması gerekmektedir. Faz tahmini için kullanılacak U işlemcisinin kontrollü bir şekilde uygulanması gerekmektedir. Şekil-2.17'de U işlemcisinin $|\psi_\lambda\rangle$ durumuna ek bir kubitte uygulaması görülmektedir.



Şekil-2.17: U işlemcisinin ek bir kubitte uygulaması. a) Kontrol kubit $|0\rangle$ durumunda olduğundan U uygulanmaz. b) Kontrol kubit $|1\rangle$ durumunda iken U uygulandığında kontrol kubit $e^{i\lambda}|1\rangle$ şeklini alır. c) Kontrol kubit kontrollü işlemciden önce süperpoze edilmişse işlem sonrası kontrol kubit bir bağıl faz ortaya çıkarır

Şekil-2.17'a görüldüğü gibi kontrollü işlemcinin tanımı gereği kontrol kubit $|0\rangle$ durumunda iken U işlemcisi $|\psi_\lambda\rangle$ durumuna uygulanamadığından özdeğer elde edilememektedir. Fakat kontrol kubit $|1\rangle$ durumunda iken giriş durumu $|1\rangle|\psi_\lambda\rangle$ şeklindedir ve kontrollü işlemci $(C - U)|1\rangle|\psi_\lambda\rangle = |1\rangle U|\psi_\lambda\rangle$ şeklinde uygulanacaktır. Daha önce de belirtildiği gibi $|\psi_\lambda\rangle$ durumu U işlemcisinin bir özdurumu olduğu varsayılmaktadır. Bu durumda

$$|1\rangle U|\psi_\lambda\rangle = |1\rangle e^{i\lambda} |\psi_\lambda\rangle \tag{2.84}$$

geçerlidir. Öte yandan bu eşitlik

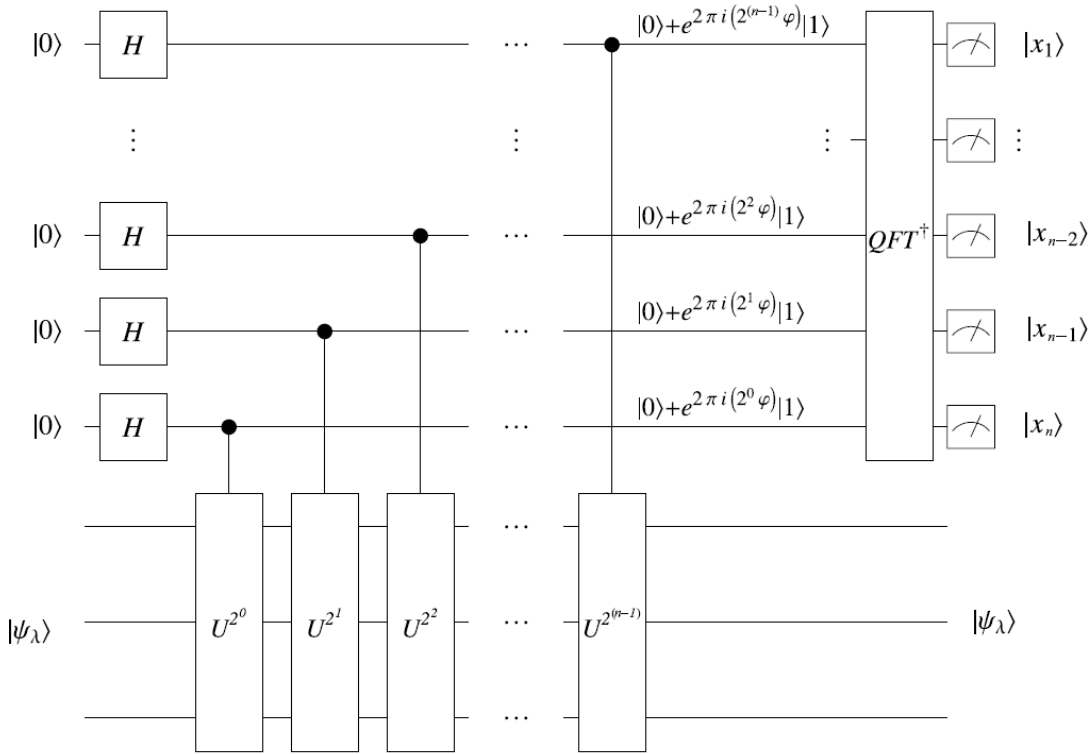
$$|1\rangle e^{i\lambda} |\psi_\lambda\rangle = e^{i\lambda} |1\rangle |\psi_\lambda\rangle \tag{2.85}$$

şeklinde de yazılabilir.

Matematiksel olarak son iki denklem son derece önemsiz görünse de bu sonuç sadece kontrol kubitte yapılacak bir ölçüm ile hedef kubitlerden gelecek özdeğer bilgisinin elde edilebileceğini göstermektedir. Ne yazık ki (2.85) denklemindeki $e^{i\lambda}$ faktörü sistem durumu için global bir fazdır ve daha önce belirtildiği gibi global fazların gözlenebilir özelliği yoktur. Fakat Şekil-2.17.c)'deki gibi kontrol kubit kontrollü işlemciden önce süperpoze edilirse bu durumda

$$(a|0\rangle + b|1\rangle)|\psi_\lambda\rangle \xrightarrow{C-U} (a|0\rangle + be^{i\lambda}|1\rangle)|\psi_\lambda\rangle \quad (2.86)$$

elde edilir. Böylece gözlenebilir ve ölçülebilir bir bağıl faz değeri elde edilebilecektir. Daha önce belirtildiği gibi $C - U$ işlemcisi φ fazının basamaklarını elde etmek için $C - U^{2^k}$ şeklinde çeşitli kuvvetlerde uygulanmalıdır. Tüm bu veriler ışığında oluşan faz tahmin algoritması Şekil-2.18'de görülmektedir.



Şekil-2.18: Abrams-Lloyd özdeğer tahmin algoritması. $|\psi_\lambda\rangle$ durumunun U işlemcisinin öz durumu olduğu ve $\varphi = 0.0.x_1.x_2 \dots x_n$ olduğu varsayılmaktadır. Burada $\lambda = 2\pi\varphi$ ve $0 \leq \varphi \leq 1$ şeklindedir

Bu algoritma, Abrams-Lloyd özdeğer ya da faz tahmin algoritması olarak bilinmektedir [76]. Algoritmanın sonunda kontrol kubitler grubuna ters kuantum fourier dönüşüm QFT^\dagger ile faz değerinin ikili basamakları $(0.x_1x_2 \dots x_n)_2 = (2^{-1}x_1 + 2^{-2}x_2 + \dots + 2^{-n}x_n)_{10}$ şeklinde elde edilmektedir.

2.3.4 Kuantum bilgisayar

Şu ana kadar üzerinde durulan kuantum hesaplama algoritmaları ve kuantum bilgi-işlem süreçlerini yürütebilmek için fiziksel bir sisteme ihtiyaç vardır. Kubitleri barındıracak, kuantum işlemleri mümkün kılacak bu fiziksel sisteme ‘kuantum hafıza’ denilmektedir. Klasik bilgisayarların işlem kapasitesini aşacak bir kuantum bilgisayarın en az 100 ila 1000 kubit içermesi gerektiği hesaplanmaktadır [77]. Di Vincenzo, İşleyebilir bir kuantum bilgisayar inşa etmek için gerekli kriterleri belli şartlara bağlamıştır [34]. Bu kriterler şöyle sıralanabilir;

1- *İyi karakterize edilmiş kubitlerle ölçeklenebilir bir sistem.* Bu kriter aday sistemin kubit temsilini başarılı bir şekilde yapması gerektiğini anlatmaktadır. Spin- $\frac{1}{2}$ çekirdekler, elektronlar veya karşılıklı yatay-dikey polarizasyona sahip fotonlar doğal kubit adaylarıdır.

2- *Sistemi bir ilk durumdan başlatabilme yeteneği.* Herhangi bir hesaplamadan önce sistem, bilinen referans bir ilk durumdan başlamadıkça hesaplamının doğruluğundan emin olunmaz. Bu yüzden sistem, kuantum hafızanın istendiğinde $|000.. \rangle$ gibi bir ilk durum almasını olanaklı kılmalıdır.

3- *Mantık kapı işlem sürelerinden uzun durulma süreleri.* Aday sistemin oluşturacağı kuantum hafızada eşevresizlik ile kuantum bilginin kaybolma süresi işlem ve ölçüm sürelerinden daha uzun olmalıdır.

4- *Bir evrensel mantık kapısı takımı.* Daha önceden açıklandığı gibi herhangi birimsel bir işlemci tek kubit ve CNOT kapılarına ayrıştırılabilir. Bu durumda aday fiziksel sisteminde tek kubit ve CNOT kapılarını uygulayabilme yeteneği olmalıdır.

5- *İstenen kubit ölçme yeteneği.* Kuantum algoritmaların uygulanmasından sonra anlamlı sonuçların alınabilmesi gerekir. Kuantum sistemlerde en genel ölçme izdüşüm ölçümlerdir. Ölçüm metodu daha çok fiziksel sistemin özelliklerine bağlıdır.

Tüm bu özellikleri aynı anda sağlayan bir fiziksel sistem çok yakın görünmese de şimdiden pek çok farklı sistemde uygulamalar yapılmıştır. Bu sistemlerden bazıları katı/sıvı-hal NMR sistemler, tuzaklanmış iyonlar, optik örgülerdeki nötr atomlar, boşluk QED sistemler, lineer optik sistemler, kuantum noktaları ve Josephson eklemleri şeklindedir. Tüm bu sistemlerin genel bir tartışması ref. [78]’de bulunabilir.

Deneysel uygulamalarda pratik olarak deneysel hatalar ve bunların giderilmesine çalışılmaktadır. Hata düzeltme kodları bu noktada önem kazanmaktadır [26-27]. Bunlara ilave olarak sistemlerin eşevresizlik sürelerini arttırmak ve kuantum bilgisini daha uzun süre korumak için pek çok çalışma yapılmaktadır. Bunlardan en önemlisi dinamik ayırım (Dynamical Decoupling-DD) metodudur [79-82]. Pratik kuantum bilgisayarların geliştirilmesi sürecinde kuantum algoritmalar bu gibi hata düzeltme yada önleme

protokolleri ile birlikte uygulanacaktır ya da topolojik kuantum hesaplama [83] gibi hatalara karşı daha dayanıklı kuantum hesaplama yöntemlerine ağırlık verilecektir.

2.4 Kuantum Simülasyon

Fiziksel sistemlerin simülasyonunun pek çok alanda önemli rolleri vardır. Bu sayede fiziksel sistemler için parametreler optimize edilebilir, veya farklı olasılıklar için sonuçlar kıyaslanabilir. Simülasyonun odak noktası bir sistemin dinamik davranışını yöneten fizik yasalarını açıklayan diferansiyel denklemlerin çözümüdür. Newton'un hareket denklemi, elektromanyetik dalga denklemi, Poisson denklemi gibi örneklerde olduğu gibi diferansiyel denklemin çözülmesindeki amaç, bilinen başlangıç koşulları kullanılarak belli bir süre sonunda sistemin son halini veya sistemi temsil eden bir parçacığın konumunu belirleyebilmektir.

Öte yandan söz konusu sistemler kuantum sistemler ise numerik simülasyon 'zor' olarak tanımlanan sınıfa girer. Örneğin n tane spin-1/2 parçacıklı sistemi klasik bilgisayarda temsil etmek için 2^n tane kompleks genlik gerekirken aynı işi kuantum bilgisayar n tane kubitte yapabilir [1]. Kuantum simülasyon, bir kuantum sistem kullanılarak başka bir kuantum sistemi simule etmek ve evrensel bir kuantum bilgisayar ile bir kuantum sistemi simule etmek olarak iki ayrı sınıfa ayrılmıştır [40]. İlkinde amaç kuantum mekaniksel bir fiziksel sistemin hamiltoniyenini kullanarak efektif olarak hedef sistemin hamiltoniyenini elde etmek ikincisinde ise amaç simule edilmek istenen hedef sistemin hamiltoniyenini verecek işlemciyi kuantum algoritmalarında evrensel işlemciler ile inşa etmektir [84]. Dijital kuantum simülasyon, Zalka'nın yaklaşımı ile Schrödinger dalga denkleminin kuantum sistemler üzerindeki dinamiğine ve dalga fonksiyonunu kubitler üzerinde eşleştirmesine dayalıdır [85].

Bu yaklaşıma göre kuantum sisteminin hamiltoniyeni $\mathcal{H} = \sum_{l=1}^L \mathcal{H}_l$ şeklinde yazılabilmeli ve yerel etkileşimleri içermelidir. Zamandan bağımsız bir \mathcal{H} hamiltoniyeni için Schrödinger denklemi $i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \mathcal{H} |\psi\rangle$ şeklinde olup, $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle = U |\psi(0)\rangle$ şeklinde de ifade edilebilmektedir. Öte yandan eğer \mathcal{H} hamiltoniyeninin komüte etmeyen $[\mathcal{H}_l, \mathcal{H}_{l'}] \neq 0$ şeklinde bir çift bileşeni bile varsa bu durumda $U = e^{-iHt} = e^{-iH_1} e^{-iH_2} \dots e^{-iH_L}$ şeklinde parçalanarak yazılamaz. Bu durum hamiltoniyen bileşenlerinin mantık kapıları cinsinden yazılması önündeki en büyük engeldir. Bunu aşmak için simülasyon süresi t ve böylece U işlemcisi M tane parçaya ayrılarak

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-iH\Delta t/\hbar} e^{-iH\Delta t/\hbar} \dots e^{-iH\Delta t/\hbar}}_{M \text{ tane}} |\psi(0)\rangle \quad (2.87)$$

şeklinde uygulanır. Burada $\Delta t = t/M$ ve $U(\Delta t) = \exp\left(-\frac{iH\Delta t}{\hbar}\right)$ şeklindedir.

Bu durumda \mathcal{H} hamiltoniyenin kömüte etmeyen herhangi iki bileşeni $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ küçük bir Δt için

$$e^{-i\mathcal{H}\Delta t} = e^{-i\mathcal{H}_1\Delta t} e^{-i\mathcal{H}_2\Delta t} + O(\Delta t)^2 \quad (2.88)$$

şeklinde yazılabilir. Bu bağıntı en basit ‘Trotter’ formülüdür [86]. Ayrıca daha yüksek dereceden ve daha az hata içeren

$$\begin{aligned} e^{-iH\Delta t} &= e^{-iH_1\frac{\Delta t}{2}} e^{-iH_2\Delta t} e^{-iH_1\frac{\Delta t}{2}} + O(\Delta t)^3 \\ e^{-iH\Delta t} &= e^{-iH_2\frac{\Delta t}{2}} e^{-iH_1\Delta t} e^{-iH_2\frac{\Delta t}{2}} + O(\Delta t)^3 \end{aligned} \quad (2.89)$$

bağıntıları da geçerlidir [87].

Tek boyutta, $V(x)$ potansiyeli ve $\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x)$ hamiltoniyeni altında bulunan bir parçacık göz önüne alınsın. Sistem, $i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \mathcal{H}\psi(x,t)$ Schrödinger dalga denklemi ile yönetilir. Burada \mathbf{p} momentum, \mathbf{x} ise yer işlemcisidir. Sürekli özdeğerlere sahip olan \mathbf{x} işlemcisi bazında parçacığı temsil eden hal vektörü sonsuz boyutlu Hilbert uzayında

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| \psi dx \quad (2.90)$$

şeklinde yazılabilir. Fakat pratikte sonlu sayıda kubit kullanılmak zorunda olduğundan belli bir $-d < x < d$ aralığında kalan bölge 2^n tane aralığa $\Delta x = 2d/2^n$ şeklinde bölünür. Burada n , sistemi temsil etmek için kullanılan kubit sayısıdır. Bu durumda sistemi temsil eden durum vektörü;

$$|\psi\rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{2^n-1} \psi(x,t) |k\rangle = \sum_{k=0}^{2^n-1} c_k(t) |k\rangle \quad (2.91)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $|k\rangle = |k_{n-1}\rangle \otimes |k_{n-2}\rangle \otimes \dots \otimes |k_0\rangle$ şeklindeki işlemsel bazlar ve $N = \sqrt{\sum_{k=0}^{2^n-1} |\psi(x,t)|^2}$ olmak üzere $1/N$ normalizasyon katsayısıdır. Öte yandan 2^n parçaya ayrılmış tek boyutlu uzay, k indeksi ile

$$x_k = -d + (k + \frac{1}{2})\Delta x \quad (2.92)$$

şeklinde yazılabilir.

Bu tanımlamalardan sonra basitlik açısından zamandan bağımsız ve konuma bağlı $\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + \hat{V}$ şeklindeki bir hamiltoniyeni göz önüne alınsın. Burada $\hat{T} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ kinetik enerji işlemcisi, $\hat{V} = V(x)$ potansiyel enerji işlemcisidir. Bu hamiltoniyeni $U(t) = e^{-i\hat{H}t}$ yürütücü işlemcisi tarafından $|\psi(0)\rangle$ haline uygulanabilir ($m, \hbar = 1$ alınmıştır). $U(t)$ işlemcisi Δt gibi bir süre için (2.88) no’lu eşitlik gereği

$$U(t) = e^{-iH\Delta t} = e^{-iT\Delta t}e^{-iV\Delta t} + O(\Delta t)^2 \quad (2.93)$$

şeklinde yazılabilir. Ancak $e^{-iT\Delta t}$ ve $e^{-iV\Delta t}$ işlemcileri sırasıyla momentum ve yer temsillerinde ‘köşegen’ işlemcilerdir. Momentum işlemcisi kuantum bilgisayarı tarafından QFT ile yer temsiline verimli bir şekilde çevrilebilir [88]. Bu durumda $U(\Delta t)$ işlemcisi kuantum bilgisayarında

$$|\psi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t) |\psi(0)\rangle \approx QFT e^{-iT\Delta t} QFT^\dagger e^{-iV\Delta t} |\psi(0)\rangle \quad (2.94)$$

şeklinde bir algoritmayla uygulanabilir [1,40,52,89]. Bu uygulamanın mümkün olabilmesi için sağlanması gereken (2.87) nolu eşitlik gereği t süresi M parçaya ayrıldığından $U(\Delta t)$ işlemcisi M kez tekrarlanarak elde edilmelidir.

2.5 NMR Spektroskopisi

Manyetik rezonans, elektron ya da çekirdek spinlerinin serbestlik derecelerini inceleyen bir spektroskopik tekniktir. Nükleer Manyetik Rezonans (NMR), çekirdek spinlerinin manyetik alanla etkileşimini inceler. NMR’ın orijini 1930’larda Isidor Isaac Rabi’nin atom çekirdeğinin manyetik karakteriyle ilgili ölçümleri olanaklı kılan bir teknik bulmasına kadar gider [90]. Rabi’nin prensibi, ilk İrlandalı fizikçi Joseph Larmor tarafından tanımlanan rezonans prensibine dayalıdır. Rabi’nin metodu daha sonra bağımsız olarak Felix Bloch ve Edward Purcell tarafından geliştirilmiştir [91-93]. Bilgisayar biliminin ilerlemesi ve Fourier dönüşüm tekniğinin kullanılması ile deneysel çalışmalar kolaylaşmıştır. İki seviyeli bir sistemin zamanla gelişiminin ilk NMR sinyali Torrey ve Hahn tarafından 1949 ve 1950 yıllarındaki deneylerde gözlemlendi [94-95]. NMR spektroskopisi ile ilgili temel kavramlar aşağıdaki gibi aşağıdaki gibi özetlenmiştir.

Yüklü parçacıklar, spinleri bu spinlere bağlı manyetik dipol moment içerdiğinden manyetik alana konduklarında bu manyetik dipollerin enerjileri manyetik alana göre yönelimlerine bağlı olur. İzole ve $I \neq 0$ olan bir çekirdek spini bir B_0 dış manyetik alana konduğunda sistem dinamiği

$$\hat{\mathcal{H}} = -\gamma \vec{I} \cdot \vec{B}_0 \quad (2.95)$$

hamiltoniyeni ile belirlenir. Burada γ çekirdek spininin jromanyetik oranı, \vec{I} ise çekirdek spin açılal momentum vektörüdür. Geleneksel olarak, uygulanan dış manyetik alan z yönündedir. Dış manyetik alan içinde nükleer manyetik moment alan doğrultusunda presesyon hareketi yapar [96]. Denklem (2.95),

$$\hat{\mathcal{H}} = -\gamma B_0 \hat{I}_z = \omega_0 \hat{I}_z \quad (2.96)$$

şeklinde de yazılabilir.

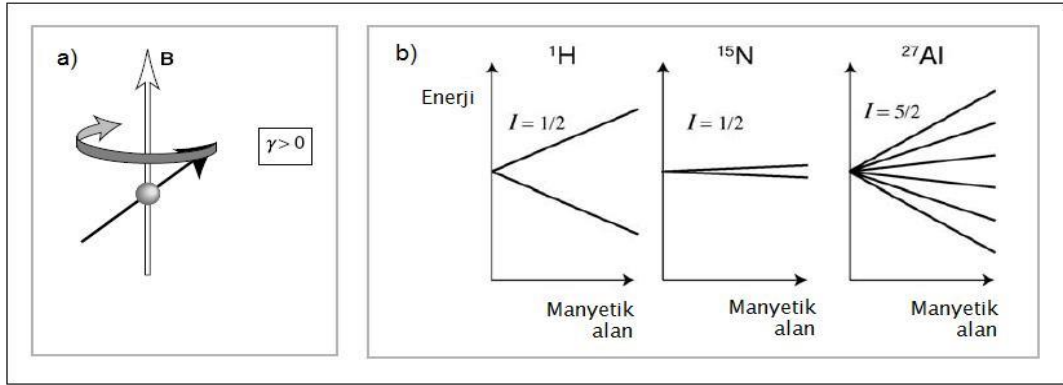
Burada ω_o Larmor frekansı olup presesyon hareketinin açısal frekansıdır ve

$$\omega_o = -\gamma B_o \quad (2.97)$$

şeklindedir. Çekirdek manyetik moment ve manyetik alan arasındaki etkileşim enerjisi

$$E = -\gamma \hbar B_o m_I \quad (2.98)$$

şeklindedir. Açısal momentum kuantum sayısı I olan çekirdeğin enerji seviyesi $2I + 1$ kat dejeneredir. Eşitlik (2.98) 'ye göre bu seviyeler manyetik alan içinde yarılmalara uğramalıdır. Buna Zeeman yarılmaları denilir. Şekil-2.19, dış manyetik alan içindeki çekirdeğin Larmor presesyonu ve bazı çekirdeklerin Zeeman yarılmalarını göstermektedir.



Şekil-2.19: Presesyon hareketi ve Zeeman yarılmaları. **a)** Jiromanyetik oranı sıfırdan büyük çekirdekler için presesyon hareketi vektör modeline göre (-) işarete karşılık gelen yön saat ibreleri yönündedir. **b)** Çekirdek spin açısal momentum sayıları verilmiş bazı çekirdeklerin Zeeman yarılmaları

Şekil-2.19'daki enerji seviyeleri arasındaki enerji farkı

$$\Delta E = \hbar \omega \quad (2.99)$$

şeklindedir. Denklem (2.99) yardımıyla rezonans frekansı büyüklüğü $\nu = \gamma B_o / 2\pi$ şeklinde bulunur. Buna göre proton için yaklaşık 11,74 T büyüklüğündeki bir manyetik alana karşılık gelen Larmor frekansı $\nu = 500 \text{ MHz}$ büyüklüğündedir. NMR spektroskopisi bu seviyeler arasındaki izinli geçişlerle ilgilenmektedir. Çekirdek spin açısal momentumu ayrıca kuantum mekaniksel bir işlemcidir ve bileşenleri matris temsilinde;

$$I_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad I_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad I_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.100)$$

şeklindedir.

2.5.1 Kimyasal kayma ve J çiftlenimi

Kimyasal kayma ve J Çiftlenimi (Spin-spin çiftlenimi) kimyacılar için maddenin kimyasal yapısının belirlenmesi açısından büyük önem taşımaktadır. Atom çekirdekleri moleküler bir yerleşim içinde olduklarından dış manyetik alanın tamamını göremezler. Çekirdeğin maruz kaldığı manyetik alan, $\tilde{\sigma}$ perdeleme tensörü olmak üzere,

$$B = B_o(1 - \tilde{\sigma}) \quad (2.101)$$

şeklindeki net manyetik alandır. Bu yerel manyetik alan nedeniyle rezonans frekansının farklı değerlere kaymasına kimyasal kayma denilir. İzotropik sıvılarda perdeleme niceliği tüm yönelimlerin ortalama bir değerine sahip olup yönelimden bağımsızdır. Kimyasal kaymanın uygulanan alandan bağımsız gösterimi

$$\delta = \frac{\omega_o - \omega_{ref}}{\omega_{ref}} \quad (2.102)$$

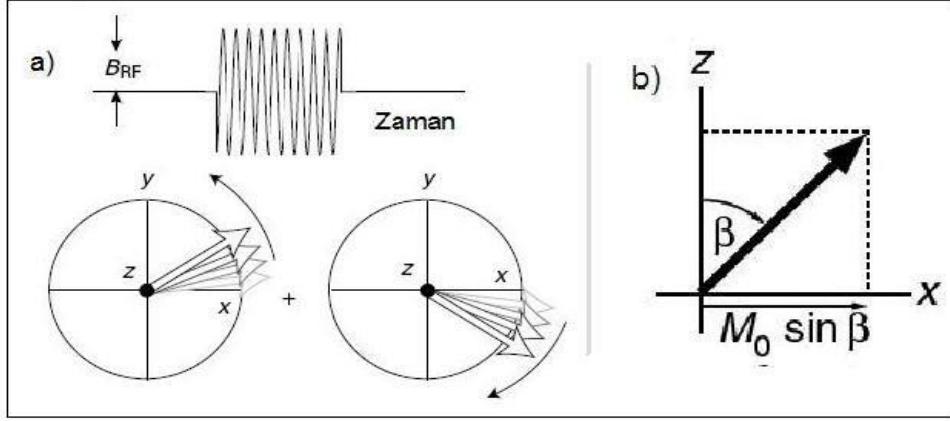
şeklinde olup ω_{ref} , referans bir maddenin rezonans frekansıdır. Çekirdek manyetik dipol momentleri sonucu oluşan ve elektronlar aracılığıyla iletilen J Çiftlenimi ise enerji seviyelerinde kaymalara, spektrumda ise sinyallerin yarılmalarına neden olur. Genel anlamda tensör karakterinde olan J çiftlenimi, izotropik sıvılar için skalerdir ve moleküler yönelimden bağımsızdır. İzotropik sıvılar için I_1 ve I_2 spinleri arasındaki J çiftlenim hamiltonyeni aşağıdaki gibidir.

$$\widehat{\mathcal{H}}_{12} = 2\pi J \vec{I}_1 \cdot \vec{I}_2 \quad (2.103)$$

Kimyasal kaymanın aksine J-çiftlenimi uygulanan manyetik alandan bağımsızdır ve birimi frekans boyutundadır. Pozitif yada negatif değerlere sahip olabilen J-çiftlenim sabitinin pozitif değeri, paralel yönelimli spin çiftleniminin enerjiye artı katkıda bulunduğu (yada tersi) anlamına gelmektedir. Genel olarak NMR dilinde spinler, $\delta \gg J$ durumu için zayıf çiftlenimli, $\delta \leq J$ için kuvvetli çiftlenimli olarak sınıflandırılırlar.

2.5.2 NMR pulsları ve döner çerçeve

Gözlenebilir bir sinyal ya da geçiş elde edebilmek için dış manyetik alan eksenine ile çakışık olan manyetizasyonu bu eksenin ayırarak transvers bileşenlerini oluşturmak gerekir. Bu durum, Larmor frekansına eşit frekansta ya da çok yakın frekansta titreşen, dış manyetik alana dik uygulanan bir radyo frekans (puls) alanı ile mümkündür. Radyo frekans pulsunu, transvers düzlemde aynı frekansta ve zıt yönde dönen iki lineer titreşken (B^+, B^-) alanın bileşimi olarak kabul etmek yararlı olacaktır.



Şekil-2.20: Titreşken manyetik alan bileşenleri **a)** Transvers düzlemde uygulanan titreşken manyetik alan bileşenleri **b)** Manyetizasyonun z ekseninden ayrılmasını gösteren vektör model [96]

Şekil-20.a) ve 20.b), bu düşüncüyü ve manyetizasyonun ilk ekseninden ayrılmasını görselleştirmektedir. Ters yönde dönen bileşenlerden biri Larmor presesyonu ile rezonansa gelerek manyetizasyonu transvers düzleme eğer. Eğme açısı, t_p pulsun uygulama süresi olmak üzere

$$\beta = \omega' t_p \quad (2.104)$$

şeklindedir. Burada $\omega' = \gamma B'$ şeklinde puls genişliğiyle orantılı frekanstır. B' radyo frekans alanları yaklaşık 10^{-3} T mertebesinde. Puls alanları uygulandığında sistem dinamiğine 'döner çerçeve' den bakmak işlemleri basitleştirir. Bu durumda (2.95) eşitliği

$$\hat{\mathcal{H}} = \Omega^o \hat{I}_z \quad (2.105)$$

halini alır. Burada $\Omega^o = \omega_o - \omega_{ref}$ şeklindedir ve bağıl Larmor frekans veya rezonans ofset adını alırken ω_{ref} , döner çerçeve frekansına eşit referans frekanstır. Bu durumda sistem hamiltonyeni, ϕ_p puls fazı olmak üzere;

$$\hat{\mathcal{H}} = \Omega^o \hat{I}_z + \omega' (I_x \cos \phi_p + I_y \sin \phi_p) \quad (2.106)$$

şeklini alır. Rezonans ofset $\Omega^o = 0$ için referans frekans tam Larmor frekansına eşittir ve manyetizasyon bu çerçevede durgun görünmektedir. Bu duruma 'on-rezonans' durumu denilmektedir.

2.5.3 Durulma

Durulma kelimesi fizik bilimlerinde, uygulanan pertürbasyondan sonra sistemin termal hale geri dönmesini belirtir [95]. Oysaki NMR durumunda sistem bir dış manyetik alana maruzdur ve termal denge durumdan farklı bir denge durumuna sahiptir. Söz konusu NMR sistemi birden dış manyetik alana maruz bırakılırsa ilk durumda sıfır olan makroskopik manyetizasyon, zamana göre üstel bir şekilde inşa edilir.

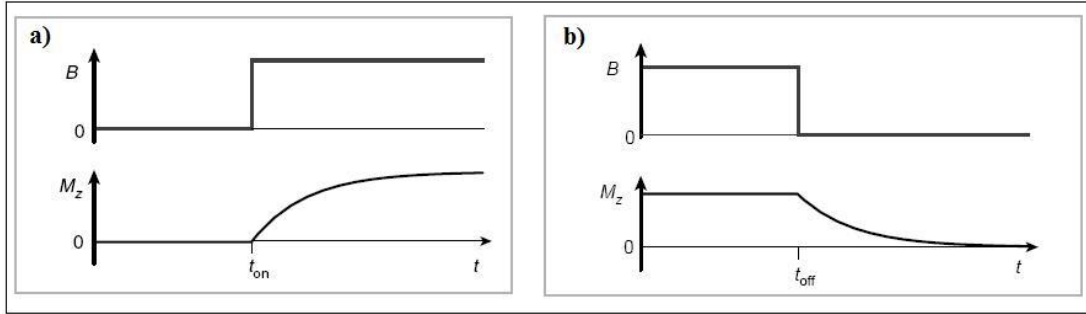
Bu durum,

$$M_z(t) = M_o(1 - e^{-(t-t_{on})/T_1}) \quad (2.107)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada M_o , B_o dış manyetik alan içinde denge durumundaki nükleer manyetizasyonun büyüklüğü, T_1 ise ‘boyuna’ ya da ‘spin-örgü’ durulma zamanı olarak bilinir. Dış manyetik alan birden kaldırıldığında ise manyetizasyon sıfıra doğru

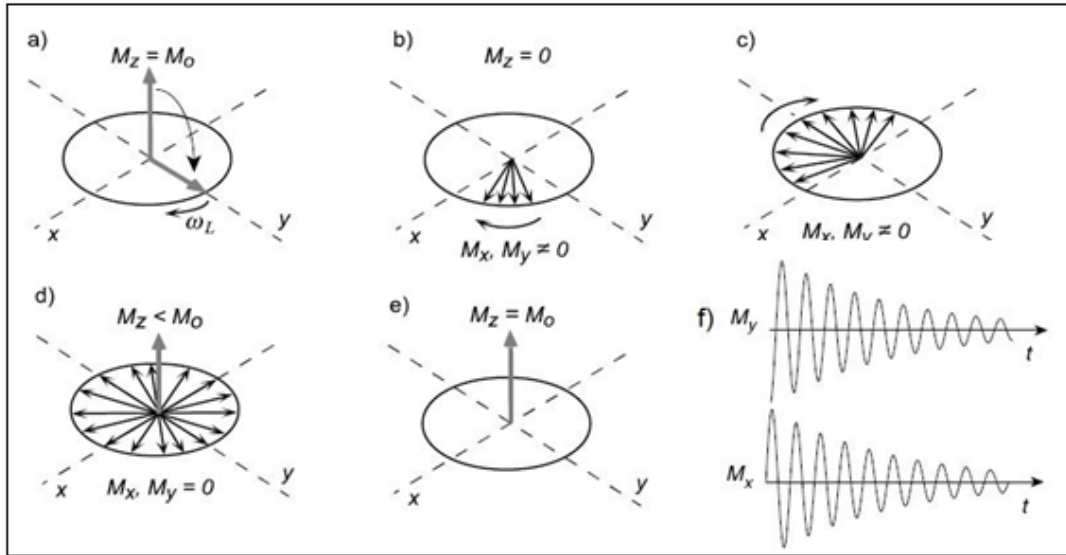
$$M_z(t) = M_o e^{-(t-t_{off})/T_1} \quad (2.108)$$

şeklinde bozunur.



Şekil-2.21: Manyetizasyon bozunumu. Dış manyetik alanın (a) açılmasıyla ve (b) kapanmasıyla boyuna manyetizasyonun oluşumu ve bozunumu

Eşitlik (2.107) ve (2.108) teki t_{on} ve t_{off} , dış manyetik alanın açılma ve kapanma anını belirtmektedir. Bu eşitliklere karşılık gelen durumların zamana göre gelişimi Şekil 2.21’deki gibidir. NMR, boyuna nükleer manyetizasyon yerine transvers düzlemdeki izdüşümü ile ilgilenir.



Şekil-2.22: rf pulsu ile transvers düzleme indirilen manyetizasyonun gelişimi. Dış manyetik alanda denge durumundaki bir sisteme bir $(\pi/2)_x$ pulsu uygulanarak nükleer manyetizasyonun y doğrultusuna döndürüldüğü düşünülmektedir

Manyetizasyon ilk anda y eksenine indiğinden transvers bileşenler, $M_x = 0$, $M_y = M_o$ şeklindedir. Laboratuvar çerçevesinden bakıldığında puls kapatılır kapatılmaz transvers düzlemdeki manyetizasyon presesyona başlayarak herhangi bir anda $M_x = M_o \sin(\omega_o t)$ ve $M_y = M_o \cos(\omega_o t)$ şeklinde bileşenlere sahip olacaktır. Ancak nükleer manyetizasyon, çok sayıda çekirdeğin manyetizasyonlarının toplamı olduğundan bir süre sonra nükleer spinler bireysel frekanslarında presesyona devam edeceklerinden transvers manyetizasyon;

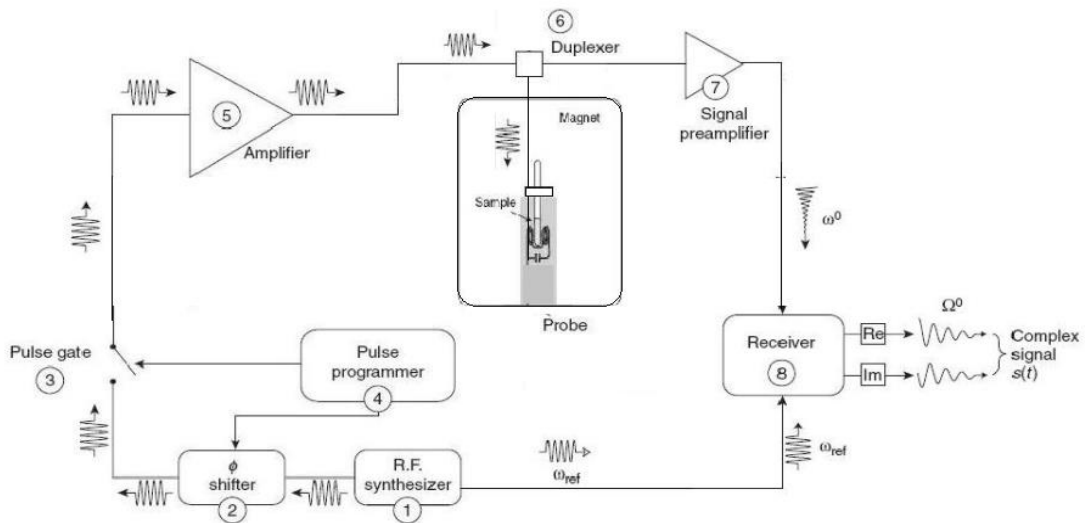
$$M_x = M_o \sin(\omega_o t) e^{-t/T_2} \quad \text{ve} \quad M_y = M_o \cos(\omega_o t) e^{-t/T_2} \quad (2.109)$$

şeklinde sönümlenmeye başlayacaktır. Burada T_2 , spin-spin yada enine durulma zamanı olarak bilinmektedir.

Şekil 2.22 (a-d) T_2 süresince, Şekil 2.22 (b-e) ise T_1 süresince transvers nükleer manyetizasyonun gelişimini göstermektedir. Eşitlik (2.108)'e göre transvers manyetizasyonun zamana göre bozunumu Şekil- 2.22f 'deki gibidir. Boyuna ve enine durulma süreleri arasında $T_1 \geq T_2$ ilişkisi vardır. Bu süreler örneğin cinsine göre değişmekle birlikte sıvı hal NMR numuneleri için mili saniye- saniye, bazı istisnai durumlarda ise saatler ya da günler mertebesindedir [96].

2.5.4 Spektrometre ve spektrum

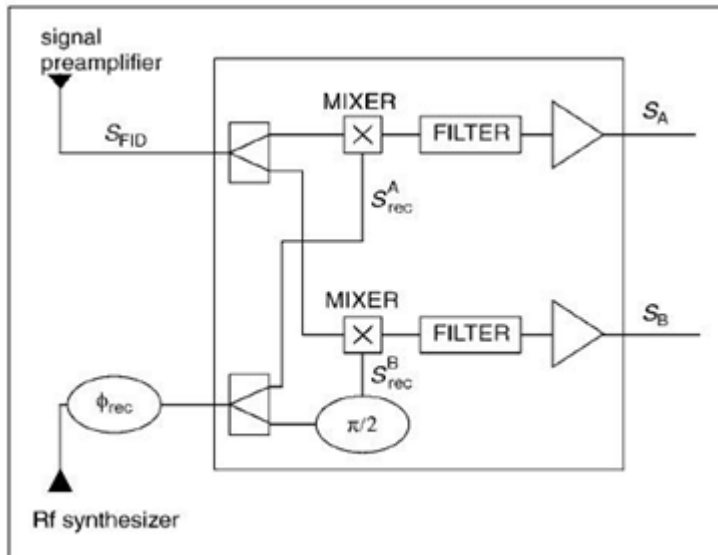
NMR sinyalleri zayıftır ve algılanabilir hale dönüştürmek gelişmiş teknik donanım gerektirir. Şekil-2.23, bir tek kanal NMR spektrometresinin temel parçalarını göstermektedir. 1 nolu parça rf sinyalin oluşturulduğu aygıttır. Oluşan bu titreşken sinyaller 2 numaralı parça olan faz kaydırıcıya gelerek puls fazları belirlenir. Puls kapısı ise oluşturulan rf puls sinyallerinin açılıp kapatılmasını kontrol ederek rf pulslarının uygulama sürelerini belirler.



Şekil-2.23 :Tek kanal NMR spektrometresinin temel bileşenleri [96]

Hem puls kapısı hem de faz kaydırıcı bilgisayar kontrolündedir. Puls fazları ϕ_p , Şekil-2.22 a) daki vektör model temsilinde gösterildiği gibi nükleer manyetizasyonun hangi eksen boyunca transvers düzleme eğileceğini belirler. $\phi_p = 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$ değerleri sırasıyla $x, y, -x, -y$ pulslarına karşılık gelir. Pulslar 5 numaralı parça olan yükselticiden geçerek dubleksere ulaşır. Dubleksere, yükselticiden gelen kuvvetli puls sinyalini numuneye yollarken numuneden gelen zayıf bozunma sinyalini ise ‘alıcı’ kısma yollar. Numune süperiletken mıknatıs birimi ile oluşturulan düzgün bir manyetik alan içindeki silindirik parçada bulunur. Bu parçaya ‘sonda’ (probe) adı verilir.

Sonda, rf pulslarını numuneye uygulayan ve numuneden gelen sinyalleri algılayan parça ve sarımlarla donatılmıştır. Dubleksere numuneden gelen sinyal, 7 nolu parça olan alıcı kısmına iletilir. NMR sinyallerinin dijital sinyallere dönüştürülerek yorumlanabilir bir çıktı elde edilmesi alıcı kısımda gerçekleştirilir. Şekil-2.23’teki 8 nolu parça olan alıcı kısmının daha ayrıntılı bir görünümü Şekil-2.24’teki gibidir.



Şekil-2.24: NMR Spektrometresinin alıcı birimi. Burada kuadratur algılama ve Kompleks sinyal çıktısını sağlayan ‘alıcı’ birimi

Sondadan gelen NMR sinyali

$$s(t) \approx \cos(\omega_0 t) e^{-\lambda t} \quad (2.110)$$

formundadır. Burada $\lambda = \frac{1}{T_2}$ ’dir ve enine sönüm sabiti olarak adlandırılır. Transvers düzlemdeki manyetizasyonun bozunmasıyla elde edilen zamana bağlı bu sinyale (FID) serbest indüksiyon bozunma sinyali denilir. Eşitlik (2.109)’dan görülebileceği gibi bu sinyalin titreşim frekansı ω_0 Larmor frekansıdır. Larmor frekansı birkaç yüz MHz boyutunda olup dijital aletlerin işlem yapmasını imkansız kılacak büyüklüktedir.

Bu sorunu aşmak için sondadan gelen sinyal ile bir referans sinyal karıştırılır. Burada karıştırıcı (Mixer)'in yaptığı işlem, Larmor ve referans sinyallerin $\cos(\omega_o t) \cdot \cos(\omega_{ref} t)$ matematiksel çarpımından ibarettir. Karışmış sinyal ;

$$s(t) = \frac{1}{2} [\cos(\omega_o + \omega_{ref}) + \cos(\omega_o - \omega_{ref})] \quad (2.111)$$

formundadır. Burada sinyallerin çarpımı olan iki kosinüs terimi için, $\cos a \cdot \cos b = \frac{1}{2} [\cos(a + b) + \cos(a - b)]$ trigonometrik özdeşliğinden yararlanılmıştır. Sinyal daha sonra Şekil-2.24'de gösterildiği gibi karıştırıcıdan sonra düşürücü filtreden geçirilerek

$$s(t) \simeq \cos(\omega_o - \omega_{ref}) e^{-\lambda t} = \cos \Omega \cdot e^{-\lambda t} \quad (2.112)$$

halini alır. Burada $\Omega = \omega_o - \omega_{ref}$ bölüm 2.5.4'te döner çerçeve açıklanırken tanımlanan rezonans ofsettir ve büyüklüğü dijital aletler için uygun bir değer olan birkaç *KHz* mertebesinde dir. Tüm bu matematiksel eşitliklerle elde edilen (2.112) eşitliği, koordinat sistemine döner çerçeveden bakma düşüncesinden başka bir şey değildir. Ancak kosinüs fonksiyonu çift fonksiyon olduğundan yani $\cos(-a) = \cos(a)$ olduğu için (2.112) eşitliği ofsetin negatif ve pozitif değerlerini ayırt edemez. Bu sorunu aşmak için sinyal iki parçaya ayrılır ve birine 90° 'lik faz farkı verilerek sinüs modülasyonu sağlanır. Bu şekle getirilen çift çıkıtlı sinyal şekline 'kuadratür algılama' denilir. Bu iki sinyal kompleks bir sinyalin gerçek ve kompleks bileşenleri olarak yorumlanabilir. Kısaca elde edilen sinyal;

$$S_{FID}(t) = S_o (\cos \Omega^o t + i \sin \Omega^o t) e^{-\lambda t} \quad (2.113)$$

şekline dönüşmüştür. Burada S_o sinyal genliğidir.

NMR spektrometrelerinde algılama, sondada birbirine dik yerleştirilmiş bobinlerle gerçekleşir. Bobinler transvers manyetizasyonun x ve y bileşenlerini ölçerler. Kuadratür algılamada manyetizasyonun x-bileşeninin reel, y-bileşeninin kompleks bileşene karşılık geldiği kabul edilir. Böylece sinyal;

$$S_{FID}(t) = S_x(t) + i S_y(t) \quad (2.114)$$

şeklinde yorumlanabilir. Zamana bağlı bu sinyalin Fourier dönüşümü ;

$$S(\Omega) = \int_0^\infty S_{FID}(t) e^{-i\Omega t} dt \quad (2.115)$$

şeklinde frekansa bağlı bir sinyaldir ve bu sinyal NMR spektrumu olarak isimlendirilir. Eşitlik (2.115)'in çözümünden oluşan spektrumda FID sinyali kendisi gibi reel ve kompleks bileşenlerden oluşan kompleks bir sinyaldir ve

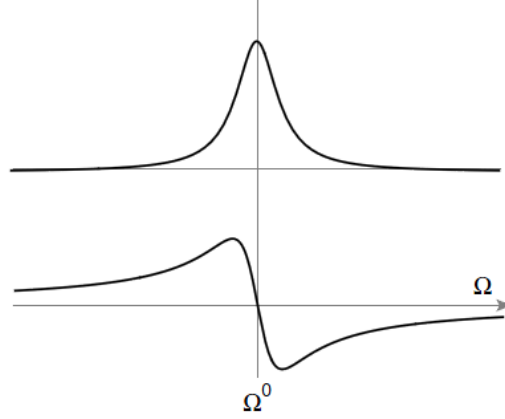
$$S(\Omega) = \mathcal{A} + i\mathcal{D} \quad (2.116)$$

şeklindedir.

Burada

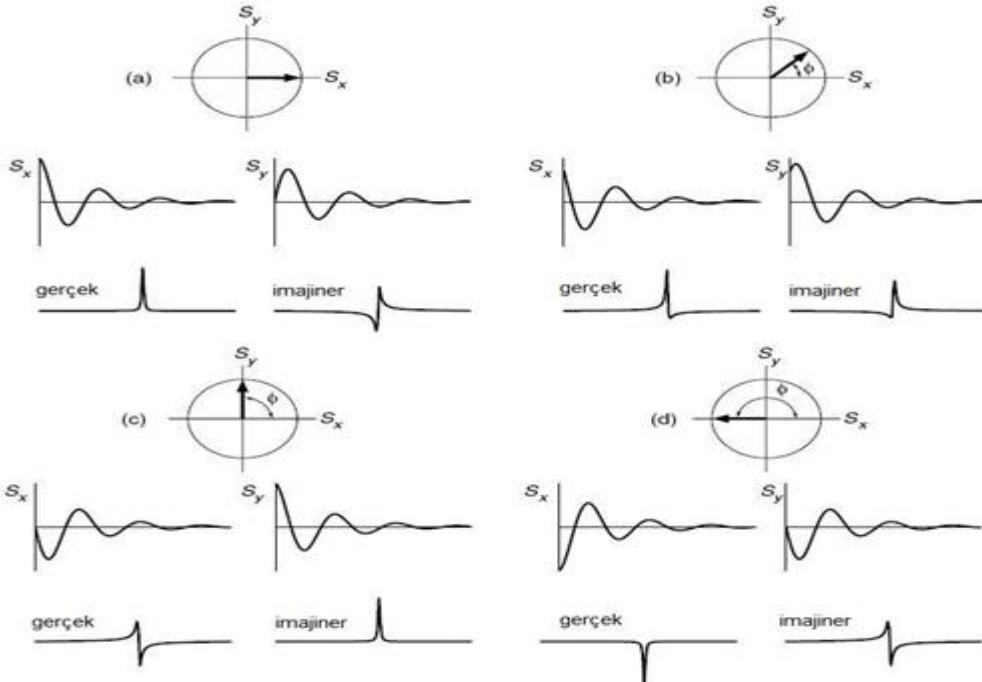
$$\mathcal{A} = \frac{\lambda}{\lambda^2 + (\Omega - \Omega_l)^2} \quad \text{ve} \quad \mathcal{D} = -\frac{\Omega - \Omega_l}{\lambda^2 + (\Omega - \Omega_l)^2} \quad (2.117)$$

şeklinde olup Ω_l , λ sinyalin merkezi genişliğini belirten parametrelerdir. Spektrumun reel ve kompleks kısımlarına denk gelen \mathcal{A} ve \mathcal{D} 'nin çizgi şekilleri Şekil-2.25'deki gibi absorpsiyon ve dispersiyon Lorentzianına karşılık gelmektedir.



Şekil-2.25:Faz duyarlı NMR spektrumu. Absorpsiyon ve dispersiyon lorentzianına karşılık gelen tek pik, faz duyarlı NMR spektrumu

Buna faz duyarlı NMR spektrumu da denir. Bu durumda eşitlik (2.113)' ye göre manyetizasyonun x-bileşeni bir absorpsiyon, y-bileşeni ise bir dispersiyon Lorentzyanına karşılık gelmektedir.



Şekil-2.26 : Faz kayması ve NMR sinyal şekillerinin değişimi. **a)** $\phi = 0$ için **b)** Herhangi bir ϕ durumu için **c)** $\phi = \frac{\pi}{2}$ **d)** $\phi = \pi$ için gösterilmiştir

Ancak teknik nedenlerden dolayı manyetizasyonun x ve y bileşenleri her zaman reel ve kompleks bileşene tam tamına karşılık gelmeyebileceğinden faz duyarlı NMR spektrumu çizgi şekilleri genelde absorpsiyon ve dispersiyon Lorentzyan şekilleri arasında bir şekle sahip olur. Bu durum, eşitlik (2.113) 'un $e^{i\phi}$ gibi bir faz faktörüyle çarpımına denktir. Bu fazın değişmesiyle spektrumun gerçek ve sanal çizgi şekillerinin nasıl değiştiği Şekil 2.26'da gösterilmiştir. Faz kontrolü bilgisayar müdahalesiyle sağlanabilir ve buna spektrumda 'faz düzeltme' denilir.

2.5.5 NMR yoğunluk matrisi

Yoğunluk matrisi formalizminin en güzel uygulama alanlarından biri NMR sistemleridir. NMR sistemleri çok sayıda özdeş spinden oluştuğundan bu sistemin oluşturduğu 'takım', dalga fonksiyonu yerine yoğunluk işlemcisiyle temsil edilir. Çünkü yoğunluk işlemcisi çok parçacıklı sistemlerin kuantum mekaniksel hallerini parçacıkların sayısından bağımsız olarak ifade eden bir metottur [96-101].

N parçacıktan oluşan kapalı bir takımdaki herhangi bir parçacığın genel bir hali $|\psi\rangle$ ile tanımlanmak üzere bu takıma karşılık gelen yoğunluk işlemcisi

$$\hat{\rho} = \overline{|\psi\rangle\langle\psi|} \quad (2.117)$$

şeklindedir. Dış çarpımın üzerindeki çizgi, sistemin tüm parçacıklar üzerinden alınan ortalama değerini belirtmektedir. Örnek olarak bireysel parçacıklardan birinin hali

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix} \quad (2.118)$$

ile belirlensin. Karşılık gelen yoğunluk işlemcisinin matris temsili,

$$|\overline{\rho}| = \begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_\alpha^* & c_\beta^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overline{c_\alpha c_\alpha^*} & \overline{c_\alpha c_\beta^*} \\ \overline{c_\beta c_\alpha^*} & \overline{c_\beta c_\beta^*} \end{pmatrix} \quad (2.119)$$

şeklinde olup bu temsile yoğunluk matrisi denir. Hermitik bir işlemci olan yoğunluk matrisi için $\rho = \rho^\dagger$ geçerli olup köşegen elemanlar toplamı $c_\alpha c_\alpha^* + c_\beta c_\beta^* = |c_\alpha|^2 + |c_\beta|^2 = 1$ 'dir. Burada $|c_\alpha|^2 + |c_\beta|^2$, sistemin α ve β hallerinde bulunma olasılıklarına karşılık gelen 'nüfus', köşegen dışı elemanlar olan $c_\beta c_\alpha^*$ ve $c_\alpha c_\beta^*$ ise 'geçişler' olarak isimlendirilir.

Sistemin hamiltonyeni $\hat{\mathcal{H}}$ olmak üzere yoğunluk matrisinin zamanla gelişimi ile ilgili denklem (2.33) geçerli olup bu gelişim $\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i[\hat{\mathcal{H}}, \rho]$ Liouville-Von Neumann denklemi ile belirlenir.

Zamandan bağımsız hamiltonyenler için (2.37) denkleminin çözümü

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}\hat{\rho}(0)e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \quad (2.120)$$

şeklinde olup $\hat{\rho}(0)$ ilk durumdaki, $\hat{\rho}(t)$ ise t süresince uygulanan $\hat{\mathcal{H}}$ hamiltonyeni altındaki gelişimden sonraki yoğunluk matrisini ifade etmektedir. Herhangi bir \hat{A} gözlenebilirinin beklenen değeri, yoğunluk matrisi cinsinden $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}\}$ şeklinde ifade edilebilir.

Herhangi bir pertürbasyon altında olmayan, termal denge durumundaki yoğunluk matrisinde geçişler olmaması gerektiğinden sadece köşegen elemanlar sıfırdan farklıdır. Termal denge yoğunluk matrisi sistem hamiltonyeni $\hat{\mathcal{H}}$ 'ye

$$\rho_o = \frac{e^{-\hat{\mathcal{H}}/k_B T}}{\sum_m e^{-E_m/k_B T}} \quad (2.121)$$

şeklinde bağlıdır. Burada k_B Boltzman sabiti olmak üzere $k_B T$ termal enerjidir. Laboratuvar koordinat sistemine göre sistem hamiltonyeni $\hat{\mathcal{H}} = -\hbar\omega_o \hat{I}_z$ şeklinde olup yüksek sıcaklık yaklaşıklığına göre $k_B T \gg \hbar\omega_o$ olduğundan (2.121) eşitliğinde pay, $\mathbb{1} + \frac{\hbar\omega_o}{k_B T}$ şeklini alır. Paydadaki toplam ise üleşim fonksiyonu olup aynı yaklaşıklıkta $2I + 1$ değerindedir. O halde genel olarak termal denge yoğunluk matrisi

$$\rho_o = \left(\frac{1}{2I+1}\right) \left(\mathbb{1} + \frac{\hbar\omega_o}{k_B T} \hat{I}_z\right) \quad (2.122)$$

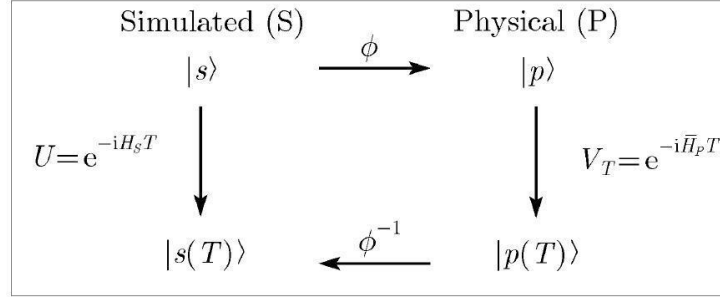
şeklinde elde edilir. Burada $\frac{\hbar\omega_o}{k_B T} = \varepsilon$, birimsiz bir faktördür. Daha sonraki kesimlerde inceleneceği üzere NMR kuantum hesaplama, $I = \frac{1}{2}$ spinleri ile ilgilendiğinden son eşitlik

$$\rho_o = \frac{1}{2}\mathbb{1} + \frac{1}{2}\varepsilon\hat{I}_z \quad (2.123)$$

şeklini alır. Burada $\mathbb{1}$, birim matris olup tüm işlemcilerle komüte ettiğinden ve zamanla gelişim göstermediğinden NMR kuantum bilgi-işlem açısından önemi yoktur ve işlemlerde çoğunlukla ihmal edilir. (2.121) denkleminin ikinci terimi olan $\varepsilon\hat{I}_z$ ise indirgenmiş yoğunluk matrisi yada sapma yoğunluk matrisi ($\Delta\rho$) olarak isimlendirilir, izsizdir ve tüm gelişimler bu matris üzerinden hesaplanır.

2.6 NMR Kuantum Simülasyon

NMR kuantum simülasyon, bir NMR hamiltoniyenin uygun müdahalelerle elde edilecek, simule edilmek istenen bir sistemin hamiltoniyenine özdeş bir efektif hamiltoniyeni elde ederek gerçekleştirilebilir [43-48]. Diğer yandan NMR sistemler, fiziksel kuantum mekaniksel sistemler olarak kullanılarak farklı kuantum simülasyon yöntemlerinin yürütücü sistemleri olarak da kullanılabilir [49-50]. Şekil-2.27 bir kuantum sistemin efektif bir hamiltoniyen altında hedef kuantum sistemi nasıl simule edeceğini açıklamaktadır.



Şekil-2.27: Simülasyon şeması. S hedef sisteminin, P fiziksel sistemi tarafından simülasyonunu temsil eden şema görülmektedir [43]

Burada amaç, Şekil-2.27'deki şemanın sol sütunundaki simule edilmek istenen S sisteminin $|S\rangle \xrightarrow{U} |S(T)\rangle$ gelişimini sağ sütunda belirtilen P fiziksel sisteminin $|P\rangle \xrightarrow{V_T} |P(T)\rangle$ gelişimiyle simule etmektir. Bunun başarılabilmesi için simule edilmek istenen sistemin hamiltoniyeni (H_S) altındaki U gelişimini, fiziksel sistemin doğal hamiltoniyeni H_P^0 'ye uygulanacak manipülasyonlarla taklit etmek gerekmektedir. Bunun içinse U gelişiminin V_T gelişimine

$$U = e^{-iH_S T/\hbar} \equiv \prod_i e^{-iH_P^0 t_i(T)} V_i = e^{-i\bar{H}_P T/\hbar} = V_T \quad (2.124)$$

şeklinde denk hale getirilmesi gerekmektedir. Burada her bir V_i , fiziksel sistemin doğal hamiltoniyenine uygulanan pertürbasyonlara, NMR kuantum simülasyon çerçevesinde ise rf pulslarına yada serbest presesyon gelişimlerine karşılık gelmekte, \bar{H}_P ise V_i müdahaleleri sonucunda ortalama hamiltoniyen teori [98,107] ile açıklanabilecek, simule edilmek istenen sistemin hamiltoniyenine denk hale getirilmiş efektif hamiltoniyendir.

Eşitlik (2.124)'den görülebileceği üzere efektif hamiltoniyen, V_i üniter işlemcilerin çarpımı şeklindedir. Bu durumda simule edilmek istenen sistemin H_S hamiltoniyeni de yürütücü işlemlerin çarpımı şeklinde yazılabilmelidir. Örnek olarak çoğu kuantum mekaniksel sistemin hamiltoniyeni $\hat{H}_S = \frac{p^2}{2m} + V$, yani $\hat{H}_S = \hat{A} + \hat{B}$ şeklindedir.

Bu tip hamiltonyenlerin yürütücü işlemcileri $[A, B] = 0$ koşulu ile $e^{-i(\hat{A}+\hat{B})\Delta t} = e^{-i\Delta t\hat{A}} e^{-i\Delta t\hat{B}}$ şeklinde yazılabilir. Ancak çoğu durumda $[A, B] \neq 0$ şeklindedir ve bazı yaklaşıklıklar gereklidir. Bu durumda eşitlik (2.87-88)'de verilmiş $e^{(A+B)\Delta t} = e^{\frac{A\Delta t}{2}} e^{B\Delta t} e^{\frac{A\Delta t}{2}} + O(t^3)$ Trooter bağıntısı kullanılabilir. Şüphesiz sistem hamiltonyenini eşitlik çarpım şeklinde yazabilmek yeterli değildir. Simülasyon için kullanılacak fiziksel sistemin hamiltonyeninin de çeşitli manipülasyonlarla sistem hamiltonyeniyle denk hale getirmek gereklidir. Manipülasyon sonucu efektif hamiltonyenin elde edilmesi ortalama hamiltonyen teori ile açıklanır.

Bir sistemin zamanla gelişimi zamana bağlı $\hat{\mathcal{H}}(t)$ hamiltonyeni ile temsil ediliyorsa belli bir t_c süresi için geçerli olmak üzere sistemin hali aşağıdaki şartlar sağlanırsa $\overline{\mathcal{H}}(t_c)$ hamiltonyeni ile açıklanabilir.

- $\hat{\mathcal{H}}(t)$ periyodik bir hamiltonyen olmalıdır.
- Gözlem, hamiltonyenin periyoduyla uyumlu bir şekilde tekrarlanmalıdır.

Ortalama hamiltonyen $\overline{\mathcal{H}}$, zamanla gelişim işlemcisinin köşegenleştirilmesini içeren tam bir çözümle ya da,

$$e^B e^A = \exp\left\{A + B + \frac{1}{2}[B, A] + \frac{1}{12}([B, [B, A]] + [[B, A], A]) + \dots\right\} \quad (2.125)$$

Baker-Campbell-Hausdorff bağıntısı [98] yardımıyla elde edilebilir. Bu bağıntı iki hamiltonyenin τ_1, τ_2 gibi iki ardışık gelişim süresine karşılık gelen t_c için uygulanırsa ;

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{H}}(t_c) = & \frac{i}{t_c} \left\{ -i(\mathcal{H}_1\tau_1 + \mathcal{H}_2\tau_2) - \frac{1}{2}[\mathcal{H}_2\tau_2, \mathcal{H}_1\tau_1] + \frac{1}{12}(i[\mathcal{H}_2\tau_2, [\mathcal{H}_2\tau_2, \mathcal{H}_1\tau_1]] \right. \\ & \left. + i[[\mathcal{H}_2\tau_2, \mathcal{H}_1\tau_1], \mathcal{H}_1\tau_1]) + \dots \right\} \end{aligned} \quad (2.126)$$

şeklinde elde edilir. Komüte eden $[\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2] = 0$ hamiltonyenleri için (2.124) bağıntısı

$$\overline{\mathcal{H}}(t_c) = \frac{1}{t_c} \{(\mathcal{H}_1\tau_1 + \mathcal{H}_2\tau_2)\} \quad (2.127)$$

şeklinde tam çözüm verir. Benzer bir yaklaşım $t_c = \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_n$ parçalı süreler için geçerli $\mathcal{H}: \{\mathcal{H}_1\tau_1; \mathcal{H}_2\tau_2; \dots\}$ hamiltonyeni için ortalama hamiltonyen farklı dereceden terimlerin katkılarıyla

$$\overline{\mathcal{H}}(t_c) = \overline{\mathcal{H}}^{(0)} + \overline{\mathcal{H}}^{(1)} + \overline{\mathcal{H}}^{(2)} + \dots \quad (2.128)$$

şeklinde elde edilir. Burada;

$$\overline{\mathcal{H}}^{(0)} = \frac{1}{t_c} \{\mathcal{H}_1\tau_1 + \mathcal{H}_2\tau_2 + \dots + \mathcal{H}_n\tau_n\},$$

$$\overline{\mathcal{H}}^{(1)} = \frac{-i}{2t_c} \{[\mathcal{H}_2\tau_2, \mathcal{H}_1\tau_1] + [\mathcal{H}_3\tau_3, \mathcal{H}_1\tau_1] + [\mathcal{H}_3\tau_3, \mathcal{H}_2\tau_2] + \dots\},$$

ve

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{H}}^{(2)} &= \frac{-1}{6t_c} \{ [\mathcal{H}_3 \tau_3, [\mathcal{H}_2 \tau_2, \mathcal{H}_1 \tau_1]] + [[\mathcal{H}_3 \tau_3, \mathcal{H}_2 \tau_2], \mathcal{H}_1 \tau_1] \\ &+ \frac{1}{2} [\mathcal{H}_2 \tau_2, [\mathcal{H}_2 \tau_2, \mathcal{H}_1 \tau_1]] + \frac{1}{2} [[\mathcal{H}_2 \tau_2, \mathcal{H}_1 \tau_1], \mathcal{H}_1 \tau_1] + \dots \} \end{aligned} \quad (2.129)$$

şeklindedir.

Periyodik hamiltonyen şartıyla formüle edilebilen ortalama hamiltonyen teori belli koşullar altında aperiodyk hamiltonyenler içinde formüle edilebilir. Buna göre t_1 periyotluk bir süre $t_1 = \sum_{j=1}^n x_j t_1$ olacak şekilde $\tau_i = x_i t_1$ şeklinde parçalara ayrılmış olsun. Bu durumda yoğunluk matrisi

$$\sigma(0) \xrightarrow{\mathcal{H}_1 x_1 t_1} \xrightarrow{\mathcal{H}_2 x_2 t_1} \dots \xrightarrow{\mathcal{H}_n x_n t_1} \sigma(t_1) \quad (2.130)$$

şeklinde gelişir. Bu sonuç, eşitlik (2.126)'de yerine konduğunda

$$\sigma(0) \xrightarrow{\overline{\mathcal{H}}(t_1) t_1} \sigma(t_1) \quad (2.131)$$

elde edilir. Eşitlik (4.7)'ye göre $\overline{\mathcal{H}}(t_1)$ aşağıdaki gibi yazılabilir;

$$\overline{\mathcal{H}}(t_1) = \overline{\mathcal{H}}^{(0)} + \overline{\mathcal{H}}^{(1)} + \overline{\mathcal{H}}^{(2)} + \dots \quad (2.132)$$

burada kuvvet serisi ;

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{H}}^{(0)} &= \mathcal{H}_1 x_1 + \mathcal{H}_2 x_2 + \dots + \\ \overline{\mathcal{H}}(t_1)^{(1)} &= \frac{-i}{2t_1} \{ [\mathcal{H}_2 x_2, \mathcal{H}_1 x_1] + [\mathcal{H}_3 x_3, \mathcal{H}_1 x_1] + [\mathcal{H}_3 x_3, \mathcal{H}_2 x_2] + \dots \} \end{aligned} \quad (2.133)$$

şeklindedir. Görüldüğü gibi $\overline{\mathcal{H}}^{(0)}$, in dışındaki yüksek mertebeden tüm terimler t_1 'e bağlıdır. O halde bu süre boyunca gelişimi zamandan bağımsız tasvir edecek bir $\overline{\mathcal{H}}$ ortalama hamiltonyen için eşitlik (2.130)'daki tüm hamiltonyenler $[\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] = 0$ şeklinde komüte etmelidir.

Bu sonuçlar basit bir örnekle açıklanabilir. Aperiodyk pertürbasyonun kullanıldığı durumlardan biri spin yankı deneyidir. Burada t_1 gelişim süresinin tam ortasında π pulsu uygulanmakta ve t_1 süresinin ilk ve ikinci yarısına denk gelen hamiltonyenler \mathcal{H}_1 ve \mathcal{H}_2 olarak kabul edilmektedir. Tüm gelişim süresi boyunca pertürbe edilmemiş hamiltonyen \mathcal{H} olmak üzere gelişimin ikinci yarısındaki hamiltonyen ;

$$\mathcal{H}_2 = \hat{R}_\pi \mathcal{H} \hat{R}_\pi^{-1} \quad (2.134)$$

şeklindedir. Burada önemli nokta \mathcal{H} hamiltonyenindeki terimlerden hangilerinin ortalama hamiltoniyene katkıda bulunacağıdır.

Pertürbe edilmemiş hamiltonyen \mathcal{H} ; π pulsu altında değişmez kalan simetrik \mathcal{H}^s , ve π pulsu altında işaret değiştiren asimetrik \mathcal{H}^a şeklinde iki terimin toplamı şeklinde yazılsın. Yukarıda belirtildiği gibi π pulsunun bu terimlere etkisi ;

$$\hat{R}_\pi \mathcal{H}^s \hat{R}_\pi^{-1} = \mathcal{H}^s \quad \text{ve} \quad \hat{R}_\pi \mathcal{H}^a \hat{R}_\pi^{-1} = -\mathcal{H}^a \quad (2.135)$$

şeklindedir. Eğer tüm terimler için $[\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] = 0$ şartı sağlanıyorsa yani $[\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2] = [\mathcal{H}_1, \mathcal{H}] = [\mathcal{H}^a, \mathcal{H}^b] = 0$ şeklinde ise ortalama hamiltonyen eşitlik (4.10) ve (4.11)'e uygun şekilde;

$$\overline{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \{ \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 \} \quad (2.136)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ simetrik ve anti simetrik bileşenler cinsinden yazıldığında

$$\overline{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \{ \mathcal{H}^s + \mathcal{H}^a + \mathcal{H}^s - \mathcal{H}^a \} = \mathcal{H}^s \quad (2.137)$$

elde edilir. Buna göre π pulsu anti-simetrik terimleri yeniden odaklamış ve efektif hamiltonyene katkı simetrik terimden gelmiştir. Bu durum zayıf çiftlenimli heteronükleer bir NMR sistemi için

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{Z_{IS}} + \mathcal{H}_{J_{IS}} \quad (2.138)$$

şeklinde örneklendirilsin. Burada $\mathcal{H}_{Z_{IS}}$, çekirdeklerin zeeman terimlerinin toplamı, $\mathcal{H}_{J_{IS}}$ ise spin-spin çiftlenim terimidir. π pulsları çekirdeklerin ikisine de uygulandığında simetrik terim $\mathcal{H}_{J_{IS}}$ ve anti simetrik terim $\mathcal{H}_{Z_{IS}}$ şeklindedir. Bu durumda efektif hamiltonyen eşitlik (2.135)'e göre

$$\overline{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_{J_{IS}} \quad (2.139)$$

şeklinde elde edilir. Eğer π pulsları çekirdeklerin herhangi birine uygulanırsa bu durumda $\mathcal{H}_{J_{IS}}$ terimi ve puls uygulanan çekirdeğin zeeman terimi antisimetrik, puls uygulanmayan çekirdeğin zeeman terimi simetrik terimdir. Bu durumda efektif hamiltonyen,

$$\overline{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_{Z_I} \quad \text{veya} \quad \overline{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_{Z_S} \quad (2.140)$$

şeklindedir. Eşitlik (2.139) ve (2.140)'de verilen sonuçlar NMR kuantum kontrol teknikleriyle aynı sonucu vermekle birlikte bu sonuçların nasıl elde edildiğini ortalama hamiltonyen teori ile açıklamaktadır.

Yukarıda belirtilenler, fiziksel sistemin nasıl manipüle edilerek istenen efektif hamiltonyenin elde edilebileceğiyle ilgili basit örneklerdendir. Belli bir süre için elde edilen efektif hamiltonyen simule edilmek istenen sistem hamiltonyenine denk hale getirilebilirse istenen kuantum sistemin hamiltonyeni farklı bir kuantum sistem kullanılarak NMR teknikleriyle simule edilmiş olur. Bu yüzden ortalama hamiltonyen teori, NMR kuantum simülasyonun kullandığı önemli araçlardan biridir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

Kuantum simülasyon, kuantum hesaplama teknikleri üzerine kurgulandığından, ilişkili amaca yönelik kuantum mekaniksel metotlar ve fiziksel gerçekleştirilmeye yönelik kuantum kontrol metotları, yöntem olarak kabul edilmiştir. Bu çalışmada NMR sistemler kuantum hesaplama amaçlarına yönelik fiziksel sistem olarak [1,63,77,102], NMR spektroskopisi metodları ise kuantum hesaplama yürütücüsü ve kuantum kontrol yöntemi olarak [35,103] benimsenmiştir.

3.1 NMR Kuantum Kontrol

NMR spektroskopisi, NMR puls tekniklerinin yarım asrı aşkın süredir sahip olduğu tecrübenin avantajlarını kullanmaktadır. Bu anlamda NMR, günümüzde bir kuantum kontrol metodu haline gelmiştir [103]. Sert ve yumuşak pulslar, biçimli pulslar, kompozit pulslar, yeniden odaklama pulsları, gradyent alanlar bu kontrol mekanizmalarından birkaçıdır [96,104-107].

3.1.1 Sert ve yumuşak pulslar

NMR pulslarının ‘sert’ yada ‘yumuşak’ olarak nitelendirilmesi pulsların genişliği yani uygulama süreleri t_p ’ye bağlıdır. Sert pulslar için t_p , genellikle μ -sn mertebesinde olup çok geniş bir frekans aralığında etkilidirler. Yumuşak pulslar içinse uygulama süresi genellikle m-s mertebesinde olup dar bir frekans aralığını etkiler. Her ne kadar tipik bir ‘dikdörtgen sert puls’ un t_p süresinin uzatılmasıyla bir yumuşak puls elde etmek mümkünse de genellikle özel fonksiyonlarla modüle edilerek ‘biçimlendirilmiş’ olarak uygulanırlar. Yumuşak pulslar çok dar bir frekans aralığına etki edebildiğinden ‘seçici pulslar’ olarak da isimlendirilirler [104].

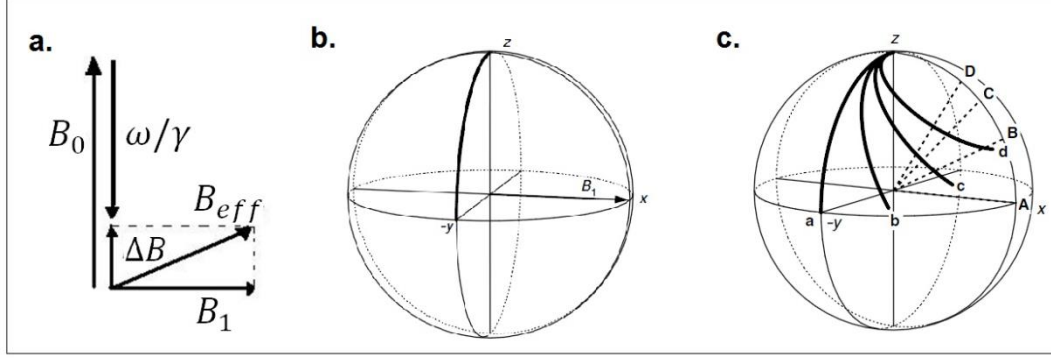
Bağlı Larmor frekans $\Omega^o = \omega_o - \omega_{ref}$ olmak üzere, $\Omega^o = 0$ durumuna on-rezonans, $\Omega^o \neq 0$ durumuna ise off-rezonans durumu denilmektedir. Döner çerçevede çekirdeğin gördüğü manyetik alan $\Delta B = \frac{\omega_o}{\gamma} - \frac{\omega_{ref}}{\gamma}$ alanıdır. Bu durumda sisteme rf alanı uygulandığında çekirdeğin gördüğü efektif manyetik alan ve frekans;

$$B_{eff} = \sqrt{\Delta B^2 + B^1^2} \quad \text{ve} \quad \omega_{eff} = \sqrt{\Delta\omega^2 + (\gamma B^1)^2} \quad (3.1)$$

şeklinde, uygulanan pulsun manyetizasyonu transvers düzleme eğme açısı ise ;

$$\beta = (\Delta\omega^2 + (\gamma B^1)^2)^{1/2} t_p \quad (3.2)$$

Şeklindedir. Çekirdeğin gördüğü efektif manyetik alan için vektör temsili Şekil-3.1 a)'daki gibi verilebilir.



Şekil-3.1:Döner çerçevede rf pulslarının ele alınışı. **a)** Döner çerçevede çekirdeğin gördüğü efektif manyetik alan ΔB ve B^1 alanlarının vektörel toplamıdır **b)** Bir 90° on-rezonans x-pulsunun manyetizasyon vektörüne etkisi **c)** On-rezonans a ve off-rezonans b,c,d 90° pulslarının manyetizasyon vektörüne etkisi

Sert pulslarda t_p 'nin küçük olması $\omega' \gg \omega_{eff}$ ya da $B' \gg \Delta B$ olmasını gerektirdiğinden (3.2) eşitliği, (2.103) eşitliğine indirgenir. Ancak yumuşak pulslarda $B', \Delta B$ alanları kıyaslanabilir durumda olduğundan kaçınılmaz olarak off-rezonans etkiler ortaya çıkmaktadır. Şekil-3.1 on ve off rezonans dikdörtgen pulsların etkisini göstermektedir. Şekil-3.1.c)'de görüldüğü gibi yumuşak bir dikdörtgen pulsun verimliliği zayıftır. Bu yüzden yumuşak pulslar daha yüksek verimlilik için farklı biçim modülasyonlarıyla uygulanırlar.

Eşitlik (2.105), döner çerçevede rf hamiltoniyeni altında tek spin takımına ait hamiltonyendir. On-rezonans durumunda ifade

$$\hat{\mathcal{H}} = \omega'(I_x \cos\phi + I_y \sin\phi) \quad (3.3)$$

eklinde olur. Bu hamiltoniyenin yürütücü işlemcisi tek spin durumu için;

$$\begin{aligned} R(\theta, \phi) &= \exp\{-i\theta(\cos\phi I_x + \sin\phi I_y)\} \\ &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbb{1} - 2i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) (\cos\phi I_x + \sin\phi I_y) \end{aligned} \quad (3.4)$$

şeklindedir. Burada $\mathbb{1}$, 2x2 boyutunda birim matris, I_x ve I_y ise (2.99) eşitliklerindeki spin açısal momentum işlemcileridir.

Çoklu spin durumunda matris temsilleri 2^N boyutlu olup ($N = 2^n$), n . spine uygulanacak x, y -pulsuları için $R_{x,y} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbb{1} - 2i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) (\mathbb{1}^1 \otimes \mathbb{1}^2 \otimes \dots \otimes I_{x,y}^n \otimes \dots \otimes \mathbb{1}^N)$ şeklindedir.

3.1.2 Kompozit pulslar

Eşitlik (3.3)'den görülebileceği gibi hamiltonyen, I_z terimi içermemektedir. Çünkü rf alanı ana manyetik alana dik x, y eksenlerinden uygulanmaktadır. Bu yüzden z dönüşü tek pulsla uygulanamaz. Kompozit puls tekniği tek bir yada birden fazla pulsun yapacağı dönüşü yine birden fazla, farklı, bitişik pulsların yapacakları dönüşlerin eşit olması durumunu kullanan bir manipülasyon tekniğidir. Örneğin I_x, I_y, I_z işlemcileri arasında $[I_x, I_y] = iI_z$ bağıntısı bulunmak şartıyla ;

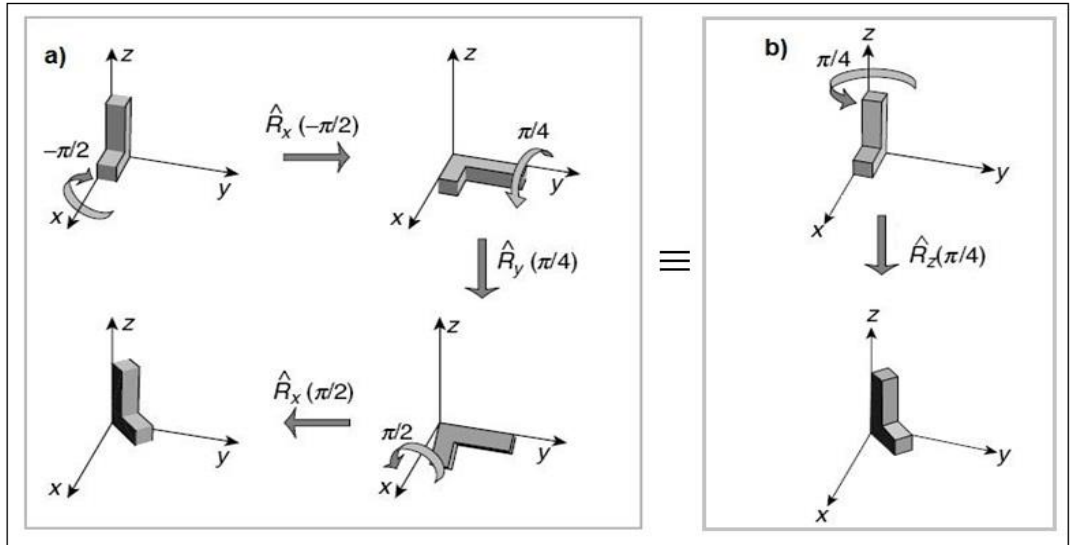
$$\widehat{R}_x(\theta)\widehat{R}_y(\beta)\widehat{R}_x(-\theta) = \exp\{-i\beta(I_y \cos\theta + I_z \sin\theta)\} \quad (3.5)$$

bağıntısı geçerlidir [96].

Burada $\widehat{R}_x(\theta) = e^{-i\theta I_x}$, x eksenini boyunca θ kadarlık pozitif yönde (saat ibrelerinin tersi yönünde) dönüşü, $\widehat{R}_x(-\theta)$, x eksenini boyunca $-\theta$ kadarlık dönüşü ve $\widehat{R}_y(\beta) = e^{-i\beta I_y}$, y eksenini boyunca β kadar dönüşü ifade etmektedir. Eşitlik (2.30)'da $\theta = \frac{\pi}{2}$ konduğunda

$$\widehat{R}_x\left(\frac{\pi}{2}\right)\widehat{R}_y(\beta)\widehat{R}_x\left(-\frac{\pi}{2}\right) = e^{-i\beta I_z} \quad (3.6)$$

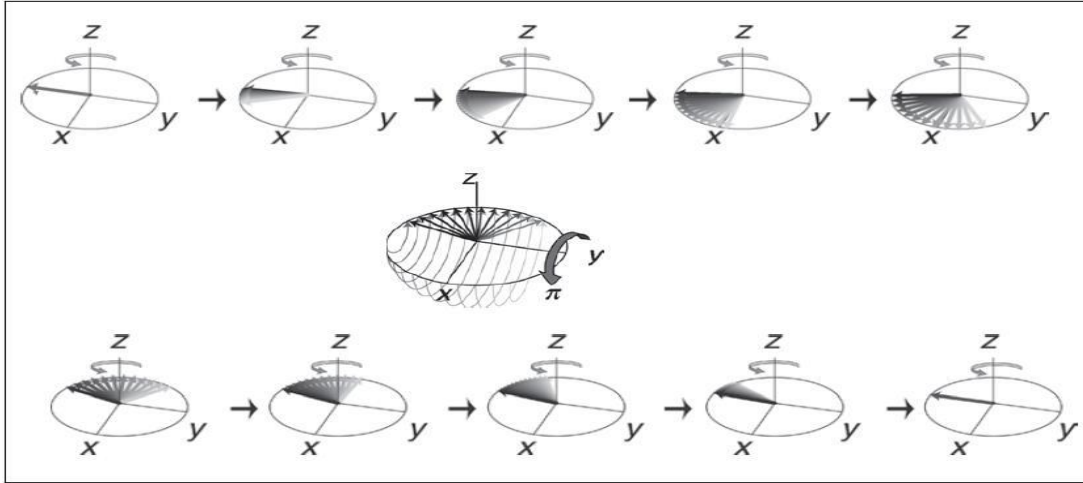
elde edilir. Bu sonuç, sırasıyla $\widehat{R}_x\left(-\frac{\pi}{2}\right), \widehat{R}_y(\beta), \widehat{R}_x\left(\frac{\pi}{2}\right)$ dönüşlerinin uygulanmasının tek bir $\widehat{R}_z(\beta)$ dönüşüne eşit olduğu anlamına gelmektedir. Şekil-3.2, L şeklindeki 3 boyutlu bir cisimle aşağıda belirtilen dönüşler uygulanarak eşitlik (3.5)'in sağlandığını görselleştirmektedir.



Şekil-3.2: Katı cisim dönüşleri. Şekilde bir katı cismin farklı eksen dönüşlerinin z eksen dönüşüyle aynı sonucu verdiği görülüyor. a) ve b)'nin özdeş olması x ve y dönüşleri ile bir z dönüşü elde edileceğini gösteriyor [96]

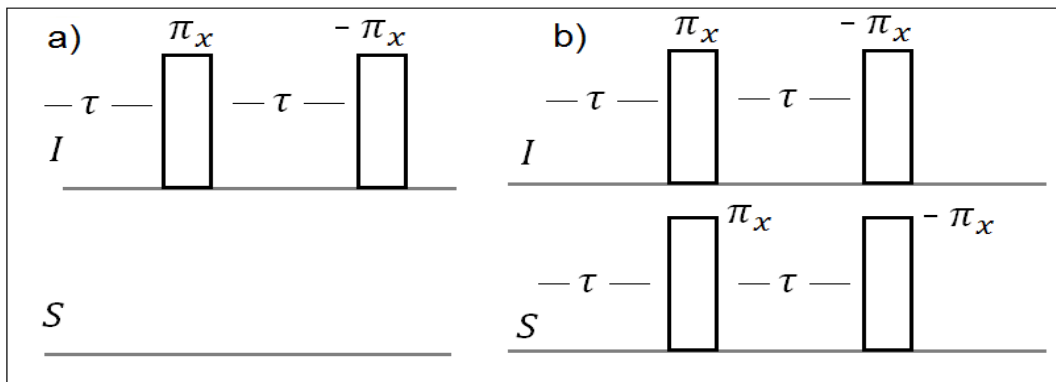
3.1.3 Yeniden odaklama pulsları

NMR modern puls tekniklerinin, Erwin Hahn'ın spin yankı deneyini geliştirmesiyle başladığı kabul edilir [108]. Manyetik alandaki homojensizlikler vb. nedenlerle transvers düzlemdeki manyetizasyonu oluşturan bireysel spinlerin frekansları farklılaşmaya başlar. Transvers eksenlerden birine uygulanacak bir π pulsu ile manyetizasyon yeniden odaklanarak ilk durum yeniden sağlanmış olur.



Şekil-3.3: $(\pi)_y$ pulsu ile transvers manyetizasyonun yeniden odaklanması [96]

Şekil-3.3, tek spin durumu için transvers manyetizasyonun yeniden odaklanmasını göstermektedir. NMR kuantum bilgi-işlemede, yeniden odaklama pulslarını çoklu spin sistemleri arasındaki istenmeyen etkileşimleri ortadan kaldırmak için kullanılabilir [98,102,104].



Şekil-3.4: İstenmeyen etkileşimlerin yeniden odaklanması. a) Odaklama pulsları çekirdeklerin birine uygulanarak H_J terimi kaldırılıyor. b) Sadece H_J terimi içinse her 2 çekirdeğe de odaklama pulsları uygulanıp Zeeman terimleri kaldırılıyor

Zayıf çiftlenimli iki spin durumu için döner çerçeve hamiltonyeni

$$\hat{\mathcal{H}} = \Omega_z^1 I_z^1 + \Omega_z^2 I_z^2 + H_J \quad (3.7)$$

şeklinde. Burada $H_J = 2\pi J I_z^1 I_z^2$ çiftlenim hamiltonyeni olup diğerleri zeeman terimleridir. Eğer istenmeyen etkileşim H_J terimi ise Şekil-3.4'teki gibi spinlerden birine sürecin ortasında ve sonunda π pulsları uygulanır [77,98,103]. Böylece bu süre için çiftlenim ortadan kaldırılmış olur.

3.1.4 Değişken alanlar

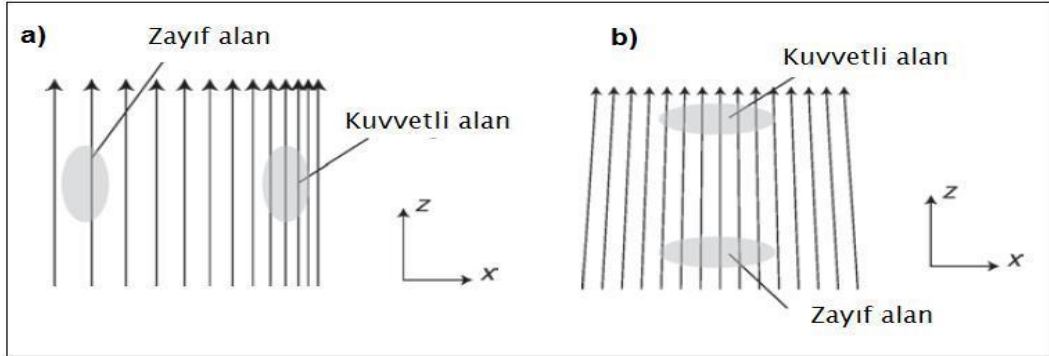
NMR spektrumlarının daha verimli elde edilmesi için dış manyetik alanın homojenliği büyük önem taşımaktadır. Ancak bazı durumlarda ise homojensizlik bilinçli olarak değişken alanlar yaratılarak (spatially gradient fields) oluşturulur. Değişken alanlar yaygın olarak NMR görüntüleme [107] kullanılmakla birlikte NMR kuantum kontrol amaçlı da kullanılmaktadır [109]. Değişken manyetik alan içindeki spinlerin Larmor frekansı

$$\omega^0(\mathbf{r}) = -\gamma B(\mathbf{r}) \quad (3.8)$$

şeklinde. Eşitlikteki $B(\mathbf{r})$, B_0 her zamanki dış manyetik alan olmak üzere,

$$B(\mathbf{r}) = B_0 \mathbf{e}_z + G_r \mathbf{r} \mathbf{e}_z \quad (3.9)$$

şeklinde. Burada G_r , değişken alanın şiddeti, \mathbf{r} ise uzaysal olarak alan değişiminin doğrultusunu belirtmektedir.



Şekil-3.5: Değişken manyetik alanlar. Değişken manyetik alanı belirten manyetik akı çizgileri görülmektedir

Şekil-3.5 a), x eksenindeki değişken alanı, Şekil-3.5 b) ise z eksenindeki değişken alanı göstermektedir. Sırasıyla bu manyetik alanlar $B(\mathbf{r}) = B_0 \mathbf{e}_z + G_x x \mathbf{e}_z$ ve $B(\mathbf{r}) = B_0 \mathbf{e}_z + G_z z \mathbf{e}_z$ şeklindedir. Dikkat edilecek olursa değişken alan doğrultusu her durumda z doğrultusu iken değişken alanın değişimi x,y,z doğrultularında olabilmektedir.

3.2 Kuantum Adyabatiklik

Kuantum adyabatik teori, zamanla yavaşça değişen hamiltonyenlerle tanımlanan sistemlerle ilgili yaklaşık yöntemler geliştiren standart bir metottur [58]. Buna göre dejenere olmayan, taban durumunda bulunan bir sistem için hamiltonyen $H^i(0)$, zamana bağlı olarak T sürede ‘yeterince yavaş’ değişim gösterecek bir süreç sonunda $H^f(T)$ hamiltonyenine dönüştüğünde de taban durumunda kalmaya devam etmektedir. Burada sistemin enerji seviyeleri arasındaki geçiş süresi yada sisteme ait karakteristik süreler, t olmak üzere, $T \gg t$ ise adyabatik koşul sağlanmıştır. ‘Yeterince yavaş’ tanımından kasıt budur. Bu durum

$$T \gg \frac{\varepsilon}{(\Delta E)^2} \quad (3.10)$$

şeklinde ifade edilir. Burada ,

$$\varepsilon = \max_{s \in [0,1]} \left| \left\langle m(s) \left| \frac{dH(s)}{ds} \right| n(s) \right\rangle \right| \quad \text{ve} \quad \Delta E = \min_{s \in [0,1]} [E_n(s) - E_m(s)] \quad (3.11)$$

şeklindedir.

Adyabatik gelişim içindeki hamiltonyen $H^{ad}(t)$, $s(t) = \frac{t}{T}$ olmak üzere;

$$H^{ad}(t) = (1 - s(t))H_o + s(t)H^f \quad (3.12)$$

şeklindedir. Burada $s(t)$, monoton bir şekilde 0’den 1’e yaklaştıkça sistemin hamiltonyeni H_o ’dan H^f ’ye yaklaşmaktadır. Adyabatik süreçleri kullanan kuantum hesaplama modeli ilk kez Farhi ve ark. tarafından sunulmuştur [110]. Öte yandan adyabatik kuantum hesaplama modelinin hesapma karmaşıklığı bakımından yaygın kuantum devre modeliyle özdeş olduğu ispatlanmıştır [111].

Pek çok kuantum simülasyon örneğinde simülasyonun arzulanan hali hedef sistemin taban durumudur. Fakat çoğunlukla bu durum bilinmemektedir. Böylece herhangi bir fiziksel sistem taban durumunda hazırlanarak simule edilmek istenen sistemin hamiltonyenine gelişim sağlarsa hedef sistemin simule edilmek istenen taban durum hamiltonyeni taklit edilmiş olur. Bu çalışma, adyabatik süreçleri NMR kuantum simülasyon amaçlı incelemektedir. Duruma NMR-kuantum simülasyon çerçevesinden bakıldığında fiziksel sistem hamiltonyeninin, arzu edilen sistem hamiltonyenine doğru gelişmesi rf pulslarıyla yürütülecektir. Bu amaca yönelik olarak (3.11) denklemini, $s_m = \frac{m}{M}$ olmak üzere;

$$H^{ad}(M) = (1 - s_m)H_o + s_m H^f \quad (3.13)$$

şeklinde yazılabilir [112]. Adyabatik süreç, farklı işlemcilerin ard arda uygulanmasıyla,

$$U^{ad} = \prod_m U_m = \prod_m e^{-i[(1-s_m)H_o + s_m H^f] \Delta t} \quad (3.14)$$

şeklinde yürütülür. Burada $\Delta t = \frac{T}{M+1}$ 'dir ve süreç $M + 1$ adımda uygulanmaktadır. Eşitlik (3.13)'deki işlemler seti, eşitlik Trotter yaklaşıklığı yardımıyla,

$$U^{ad} = \prod_m (e^{-i(1-s_m)H_0 \frac{\Delta t}{2}} e^{-is_m H^f \Delta t} e^{-i(1-s_m)H_0 \frac{\Delta t}{2}}) \quad (3.15)$$

şeklinde rf puslarıyla uygulanmaya elverişli hale getirilebilir.

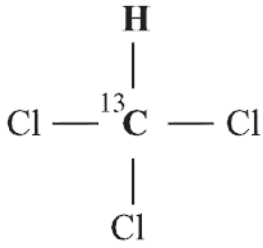
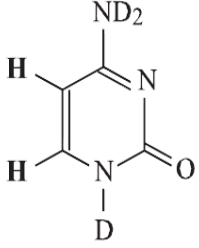
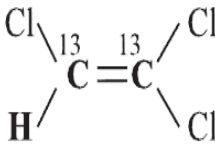
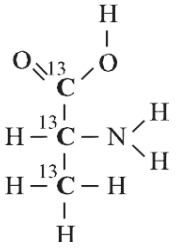
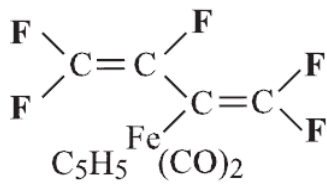
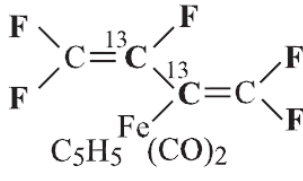
3.3 Sıvı-Hal NMR Kuantum Hesaplama

NMR kuantum hesaplama, NMR teknikleri ile kuantum hesaplamayı yürüten fiziksel gerçekleştirme tiplerinden biridir [35,113]. NMR kuantum hesaplama, NMR teknikleri ile kuantum bilgisayar için fiziksel gerçekleştirme çalışmaları içinde en çok yayın yapılan sistemlerdendir. Di Vincenzo kriterleri [34] bakımından NMR kuantum bilgisayarın kriterleri sağlama durumu aşağıdaki gibi özetlenebilir.

- **Kubit Temsili:** Spin- $\frac{1}{2}$ atom çekirdekleri kubitleri temsil eder. Sıvı hal-NMR'da kubitler rezonans frekanslarına yada kimyasal kaymalarına göre adreslenir. Burada kubitleri oluşturan bazların çekirdek spin halleriyle $|0\rangle = |+\frac{1}{2}\rangle$, $|1\rangle = |-\frac{1}{2}\rangle$ şeklinde ilişkisi bulunmaktadır. Bunları karşılayan ve en çok kullanılan çekirdekler : 1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{15}N , ^{31}P , ^{29}Si şeklindedir.
- **İlk Durum Hazırlama:** Kubitler safımsız hal hazırlama teknikleri ile iyi belirlenmiş ilk durumlara sokulabilirler [114]. Ancak ilk duruma sokulacak kubit sayısının artması ilk duruma sokulmuş kubitlerden gelen sinyallerin üstel olarak azalmasına neden olmaktadır.
- **İşlem Süresi ve Durulma Süresi:** Sıvı hal-NMR kuantum bilgisayarda mantık kapısı işlem süreleri milisaniye mertebesinde, durulma süreleri ise saniyeler mertebesinde olması bu kriteri en iyi biçimde karşılamaktadır.
- **Evrensel Mantık Kapısı Takımı:** Gelişmiş puls teknikleri ile NMR, mantık kapısı oluşturmada son derece başarılıdır. Pulslarla oluşturulan dönüler üniter mantık kapılarına karşılık gelmektedir.
- **Çıktı Okuma:** İşlem sonucunda sistemin durumunu belirleme, spin takımının halini belirleyen yoğunluk matrisinin tomografi teknikleri ile hesaplanması ile mümkün olabilmektedir [115].

Sıvı-hal NMR kuantum bilgisayar için 'kuantum hafıza' olarak en çok kullanılan moleküllerden bazıları kullanıldıkları çalışmaları belirten referanslarla Çizelge-3.1'de verilmiştir.

Çizelge-3.1: NMR kuantum hesaplamada en çok kullanılan moleküller.

Kimyasal Temsil	Molekül-Kubit	Referans
	¹³ C etiketli Kloroform 2 kubitlik molekül: H ve ¹³ C	[114,116]
	¹³ C etiketli Sitozin 2 kubitlik molekül: 2 tane H	[117,118]
	Trikloretilen 3 kubitlik molekül: 1 H ve 2 tane C	[119,120]
	¹³ C etiketli Alanin 3 kubitlik molekül 3 tane ¹³ C	[121]
	Pentafluorobutadienl cyclopentadienyldicarbonyliron kompleksi 5 kubitlik molekül: 5 tane ¹⁹ F	[122]
	Perfluorobutadienyl demir kompleksi: 7 kubitlik molekül 5 tane ¹⁹ F ve 2 tane ¹³ C	[39]

Hamiltoniyenin sadeliği nedeniyle sıvı-hal NMR kuantum hesaplama amaçlı en çok çalışılan NMR sistemi olmuştur. Teorik olarak bir sıvı NMR numunedeki her bir molekül bir kuantum bilgisayar görevi görmektedir. Fakat çekirdek manyetik momentleri çok zayıf olduğundan ancak çok sayıda özdeş molekülün (yaklaşık 10^8 tane) oluşturduğu bir takım anlamlı sinyal verebilmektedir.

NMR kuantum bilgi-işlemede tek kubitlik mantık kapıları spin çiftlenim hamiltoniyeni ve $90_{x,y}^0$ pulsları ile oluşturulabilir. X, Y, Z kapıları $90_x^0, 90_y^0, 90_z^0$ dönülerine karşı gelmek üzere;

$$\begin{aligned} X &= e^{-i\frac{\pi}{2}I_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \\ Y &= e^{-i\frac{\pi}{2}I_y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \\ Z &= e^{-i\frac{\pi}{2}I_z} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & 0 \\ 0 & 1+i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.16)$$

şeklindedir. Burada Y 'sahte hadamard' kapısıdır. Z dönüsünün uygulanabilmesi için kompozit pulslar kullanılabilir. Ayrıca NOT kapısı

$$(\pi)_x = e^{-i\pi I_x} = e^{-i\frac{\pi}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

şeklinde elde edilmektedir.

İki kubit durumu için NMR hamiltoniyeni

$$\hat{\mathcal{H}} = \Omega_I^0 I_z + \Omega_S^0 S_z + 2\pi J I_z S_z \quad (3.18)$$

şeklindedir. Burada I_z ve S_z çekirdeklerin spin açıl momentum işlemcileri J ise çekirdekler arası çiftlenim sabitidir. Çoklu kubit mantık kapıları için kubitler arası etkileşim gereklidir. Sıvı hal-NMR uygulamalarında bu etkileşim J çiftlenimidir. Örneğin en önemli 2-kubitlik mantık kapılarından biri olan $CNOT$ mantık kapısı için uygun bir puls dizisi;

$$(CNOT)_{IS} = (Y)_S \rightarrow R_{zz}\left(\frac{\pi}{2}\right) \rightarrow (\bar{Z})_S \rightarrow (Z)_I \rightarrow (\bar{Y})_S \quad (3.19)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bazı işlemcilerin üzerindeki çizgiler ters yönde dönüleri belirtmektedir. Eşitlikteki $R_{zz}\left(\frac{1}{2}\right)$ dönüsü ise iki kubit arasındaki etkileşimi sağlayan 90° lik çiftlenim dönüsüdür. Bu dönüyü oluşturabilmek için söz konusu iki kubit $\frac{1}{2J}$ süresi boyunca hiçbir pertürbasyon olmaksızın

$$\mathcal{H}_J = 2\pi J \hat{I}_z \hat{S}_z \quad (3.20)$$

hamiltoniyeni altında geliştirilir. Ancak bu hamiltonyen (3.18) bağıntısında belirtildiği gibi sistem hamiltonyeninin sadece bir bölümü olduğundan sadece bu kısmı efektif olarak elde etmek için daha önce değinilen yeniden odaklama pulsları kullanılmalıdır.

Bağıntı (3.20)'daki hamiltonyenin yürütücü işlemcisi ;

$$\hat{R}_{zz}(\theta) = e^{-i(\pi J \tau) 2I_z \otimes S_z} \quad (3.21)$$

şekindedir. $\hat{R}_{zz}(90^\circ)$ için $\theta = \pi J \tau$ 'da $\theta = \frac{\pi}{2}$ konarak $\tau = \frac{1}{2J}$ süresi elde edilmiştir. Tüm bunlar (3.20) bağıntısında yerine konduğunda

$$\hat{R}_{zz}\left(\frac{\pi}{2}\right) = e^{-i\pi I_z \otimes S_z} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & & & \\ & 1+i & & \\ & & 1+i & \\ & & & 1-i \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

elde edilir. CNOT kapısı için (3.19)'da verilen puls dizisi işlemci temsilinde aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$(CNOT)_{IS} = (\bar{Y})_S (Z)_I (\bar{Z})_S R_{zz}\left(\frac{\pi}{2}\right) (Y)_S \quad (3.23)$$

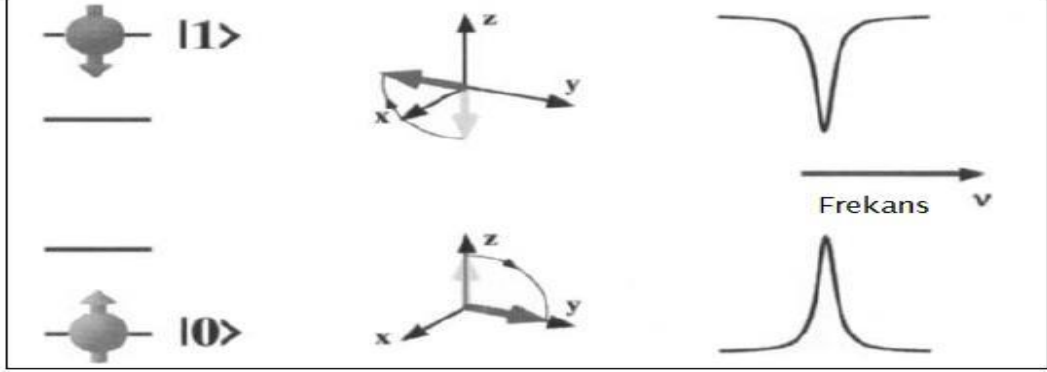
Eşitlik (3.22)'deki tek kubit dönüleri olan $(Z)_I = Z \otimes \mathbb{1}$, $(\bar{Z})_S = \mathbb{1} \otimes \bar{Z}$, $(Y)_S = \mathbb{1} \otimes Y$, $(\bar{Y})_S = \mathbb{1} \otimes \bar{Y}$ şeklindedir. Tüm bu verilenler eşitlik (3.7)'de yerine konduğunda I kontrol, S hedef kubit olmak üzere; $(CNOT)_{IS}$

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1+i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1+i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1+i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1+i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1+i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1+i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \\ &(CNOT)_{IS} = \frac{1-i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.24) \end{aligned}$$

şeklinde elde edilmiş olur. Sonuç global bir faz faktörü çarpanı dışında CNOT kapısıyla aynıdır. Global faz faktörünün gözlenebilir bir özelliği olmadığından sonuç CNOT kapısı için tamamen uygundur.

3.3.1 NMR kuantum hal tomografisi

NMR kuantum hesaplamada uygulanan işlemlerin ve algoritmaların sonucu NMR spektrumlarının yorumlanmasıyla mümkündür. Şüphesiz sıvı-hal NMR kuantum hesaplama, özdeş spinlerden oluşan takımlarla ilgilendiğinden NMR spektrumlarını oluşturan algılama işlemi, dalga fonksiyonunun çökmesini içeren bilindik kuantum bilgi-işlem ölçüm süreçleriyle değil, üniter işlemcilerle meydana getirilen geçişlerin gelişimini sağlamakla başarılıdır.



Şekil-3.6: Geçişlere çevrilen nüfuslar. NMR spektrumu, nüfusların ölçüm öncesi halini belirlemektedir

Şekil-3.6, tek kubit durumundaki spin takımının nüfuslarının iki enerji öz durumundan birinde bulunması halinde gözlenen sinyalleri göstermektedir. Şekilden görüldüğü gibi saf $|0\rangle$ temel halde bulunan nüfuslar pozitif, saf $|1\rangle$ üst enerji halinde bulunan nüfuslar ise negatif absorpsiyon spektrumu vermektedir. Spin hallerinin $|0\rangle, |1\rangle$ gibi iyi belirlenmiş saf hallerde bulunması termal denge durumunda sıvı hal-NMR numunelerinde mümkün değildir. Bu durumda sistemin halini belirlemek için yoğunluk işlemcisinin elemanlarının kuantum hal tomografisi denilen işlemlerle belirlenmesi gerekir [1]. NMR örneğinin durumunu temsil eden yoğunluk matrisinin elemanlarını yine NMR yöntemleri kullanarak belirlenmesini öngören NMR kuantum hal tomografisi ilk kez Chuang tarafından uygulanmıştır [115]. Bu durum için tek kubitlik yoğunluk işlemcisi örnek olarak verilebilir. Bir tek kubit yoğunluk işlemcisinin en genel hali

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \mathbb{1} + a_1 I_x + a_2 I_y + a_3 I_z \quad (3.25)$$

şeklinde verilsin. Karşılık gelen yoğunluk matrisi,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & 1 - a_3 \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

şeklinde olacaktır. Burada köşegen dışı elemanların sıfırdan farklı olması algılamada NMR sinyali alınacağını göstermektedir.

$M_x = \text{İz}\{\rho I_x\}$ ve $M_y = \text{İz}\{\rho I_y\}$ şeklinde elde edilen sinyallerle a_1, a_2 elde edilir. Spektrumda absorpsiyon çizgilerinin integralleri ya da genlikleri matris elemanları ile orantılı büyüklük olarak kabul edilebilir. Eğer durum termal denge durumu ise yoğunluk matrisi

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_3 & 0 \\ 0 & 1 - a_3 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

şeklinde olacaktır. Beklendiği gibi köşegen dışı elemanlar sıfırdır. Yoğunluk matrisinin hesaplanması gereken tek elemanı olan a_3 , rf pulsu ile geçişlere çevrilip ölçülmelidir. Bunun için yoğunluk matrisine $90^\circ X$ dönüşü uygulandığında;

$$\hat{\rho}' = X\hat{\rho}X^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & ia_3 \\ -ia_3 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

elde edilir. Böylece a_3 geçişler sinyallere dönüşerek elde edilen FID ile $M_y = \text{İz}\{\hat{\rho}' I_y\}$ şeklinde hesaplanır.

3.3.2 Safımsı haller

Sıvı hal-NMR deneyleri oda sıcaklığında termal dengede bulunan spin sistemleriyle ilgilenir. Bu durum, iyi belirlenmiş saf hallerden işleme başlayan kuantum algoritmaların uygulanması için hiçte elverişli değildir. Ancak NMR-kuantum kontrol ve manipülasyon metotlarıyla saf durumdaki bir 'ilk hal' gibi davranan kuantum halleri elde edilebilmektedir [1,63,102]. Safımsı haller sapma yoğunluk matrisi $\Delta\hat{\rho}$ 'yu saf hale getirerek elde edilir.

Safımsı hallerin elde edilmesi için uygulanan yöntemlerden biri Gershenfeld ve Chuang'ın geliştirdiği 'hal etiketleme' yöntemidir [123]. Bu yöntemde göre N kubitlik bir sistemde kubitlerden biri 'etiket' kubit olarak belirlenirken N-1 tane kubit safımsı hale sokulmaktadır. Bu teknikte etiket kubit (ancilla) yardımcı kubit olarak görev yaptığından safımsı hallere N-1 tane kubit hazırlanabilmektedir. Diğer bir metot 'geçici toplam' metodudur [114]. Burada sapma yoğunluk matrisine uygulanan üç farklı işlemin sonucunun toplamı safımsı hallere eşit bir sonuç vermektedir. Bir önceki metottaki gibi yardımcı kubit gereksiz olmayan bu metotta safımsı halleri elde edebilmek için üç farklı deney yapılması gerekmektedir. Çok kullanılan bir diğer metot ise 'uzaysal ortalama' (spatial averaging) metodudur [31]. Burada safımsı halleri hazırlamak için sistem uzaysal alt sistemlere ayrılarak tüm alt sistemlerin sürekli toplamı alınır. Bu alt sistemleri oluşturmak için numunenin değişik bölgelerindeki Larmor frekansı farklılaştırılmalıdır. Bu ise gradyent alanlarla yapılmaktadır. Bu metodun avantajı yardımcı kubit ya da çoklu deneylere gerek olamamasıdır.

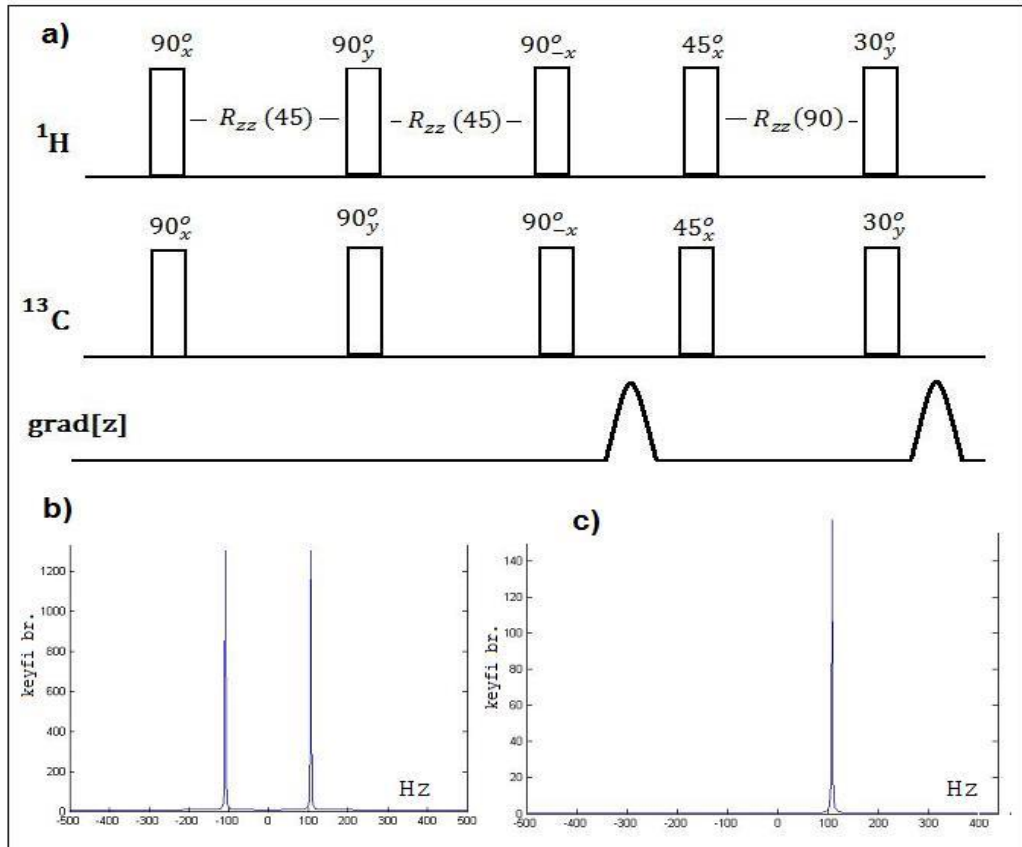
Safımsı hal hazırlama her NMR kuantum hesaplama uygulamasından önce yapılan standart bir metottur. Bu çalışma, safımsı haller için ‘uzaysal toplam’ metodunu benimsemiştir. Örnek olarak 2 kubitlik kloroform molekülü ile hazırlanan $|00\rangle\langle 00|$ safımsı hali aşağıdaki gibi incelenebilir. Kuantum hafıza olarak kullanılan kloroform ($^{13}\text{CHCl}_3$) molekülü için hamiltonyen

$$\hat{H} = \omega_I \hat{I}_z + \omega_S \hat{S}_z + 2\pi J \hat{I}_z \hat{S}_z \quad (3.29)$$

şeklindedir. Burada I ^1H atomu, S ise ^{13}C atomunu temsil etmekte olup ω_I ve ω_S bu atomlara karşılık gelen Larmor frekansları ve J ise bu atomlar arasındaki skaler çiftlenim sabitini belirtmektedir. Termal durumda sistemin yoğunluk matrisi

$$\hat{\rho} = a_I \hat{I}_z + b_S \hat{S}_z \quad (3.30)$$

şeklindedir. Burada a_I ve b_S , sırasıyla ^1H ve ^{13}C çekirdeklerinin jromanyetik oranları ile orantılı sabitlerdir. Bu durumda a_I ve b_S katsayılarının oranı $\frac{a_I}{b_S} \approx 4$ olduğundan başlangıçta sistemi oluşturan çekirdeklerin popülasyonu eşit değildir. Safımsı hallerin hazırlanmasından önce popülasyonlar eşitlenir.



Şekil-3.7: Safımsı hallerin hazırlanması **a)** Kloroform molekülü için popülasyon eşitleyen ve $|00\rangle\langle 00|$ safımsı halini hazırlayan puls dizisi . **b)** Kloroform molekülü için termal durum proton kanal sinyali **c)** Kloroform molekülü için elde edilen safımsı hal sinyali

Bunun için uygun bir puls dizisi

$$\left(\frac{\pi}{2}\right)_x^{I,S} \rightarrow U_J\left(\frac{1}{4J}\right) \rightarrow \left(\frac{\pi}{2}\right)_y^{I,S} \rightarrow U_J\left(\frac{1}{4J}\right) \rightarrow \left(\frac{\pi}{2}\right)_{-x}^{I,S} \rightarrow grad[z] \quad (3.31)$$

Şeklindedir [124]. Verilen puls dizisi Şekil-3.7’de resmedilmiştir. Burada $grad[z]$, z yönünde gradyent alanı ifade etmektedir. Popülasyonlar eşitlendikten sonra

$$\left(\frac{\pi}{4}\right)_x^{I,S} \rightarrow U_J\left(\frac{1}{2J}\right) \rightarrow \left(\frac{\pi}{6}\right)_y^{I,S} \rightarrow grad[z] \quad (3.32)$$

şeklindeki puls dizisiyle $|00\rangle\langle 00|$ safımsı hali elde edilmektedir. Safımsı hallerin hazırlanmasında sert dikdörtgen pulsler kullanılmış olup gradyent alanlar ise sinüs fonksiyon şekilli ve 400 mikro saniye uzunluğundadır. Deneyler ‘on rezonans’ durumunda yapıldığından rf pulsleri yokluğunda sistem, (3.29) hamiltonyenindeki terimlerden üçüncü terim olan çiftlenim hamiltonyeni altında gelişmektedir. Şekil-3.7a)’da $R_{zz}(45^\circ)$ ve $R_{zz}(90^\circ)$ dönülerine karşılık gelen süreler sırasıyla 1,16 ve 2,32 m saniye şeklindedir.

3.4 İteratif Faz Tahmini

Önceki bölümde açıklanan faz tahmin algoritması enerji bilgisi elde etmek için kullanılabilir [51]. Burada herhangi bir \hat{U} üniter işlemcisi, \hat{H} hamiltonyeninin $U = e^{-iH\tau}$ şeklinde yürütücü elemanıdır.

Yukarıda belirtilen amaca yönelik

$$\hat{U}|\psi\rangle = e^{-iH\tau}|\psi\rangle = e^{-2\pi\phi}|\psi\rangle \quad (3.33)$$

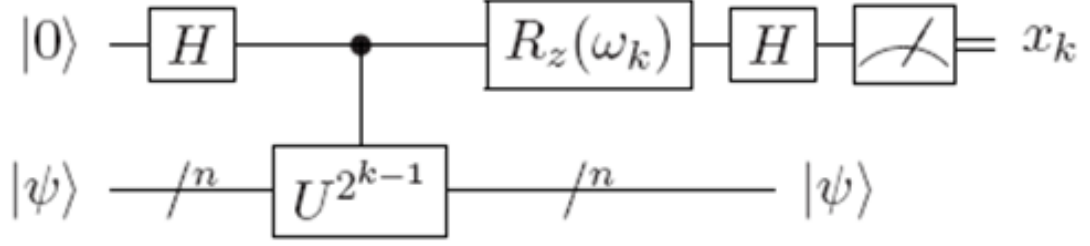
özdeğer denklemi sağlanmalıdır. Bu durumda enerji E,

$$E = \frac{2\pi\phi}{t} \quad (3.34)$$

şeklinde fazla ilişkilendirilmiştir. Kuantum hesaplamada kullanılan sayısal bazlar $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ ikili sisteme ait olduğundan $\phi = e^{-2\pi i\phi}$ için

$$\phi = 0. \phi_1\phi_2 \dots \phi_3 \pmod{2} \quad (3.35)$$

şeklinde olmalıdır. Buradaki her bir ϕ_n değeri u işlemcisinin U^{2^k} şeklindeki kuvvetleri tarafından uygulanarak elde edilmelidir. Pratik uygulama açısından Şekil-2.18’de açıklanan faz tahmin algoritması elverişli değildir. Uygulamada daha az kubit kullanarak faz tahmini yapmak için iteratif faz tahmin algoritması önerilmiştir [125]. Buradaki fark çıkarılacak her bir bit sayısı kadar kubit kullanmak yerine deneyin bu sayı kadar iteratif tekrarına dayanır.



Şekil-3.8: İteratif faz tahmin algoritması. Algoritma en az 2 kubitten oluşmaktadır [125]

İteratif faz tahmin algoritması için önerilen bir düzenek Şekil-3.8’deki gibidir. Burada ölçüm öncesi uygulanan ters kuantum fourier dönüşüm yerine hadamard dönüşüm uygulanmıştır. Referans [125]’de önerilen iteratif faz tahmin algoritmasına göre ϕ fazı ikili sisteme göre m taneden fazla olmayan

$$\phi = 0. \phi_1 \phi_2 \dots \phi_m \pmod{2} \quad (3.36)$$

şeklinde bitlere sahiptir. İlk iterasyon $k = m$ ‘den başlayacak, böylece en az hassas bitlerden başlanarak en duyarlı bitlere kadar bilgiler çıkarılacaktır. Şekil 3.8’deki şemaya göre sistem $|0\rangle|\psi\rangle$ hali ile başlamakta ve ilk kubite H (hadamard) mantık kapısı uygulanmaktadır. O halde

$$|0\rangle|\psi\rangle \xrightarrow{H \otimes I} \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|\psi\rangle + |1\rangle|\psi\rangle) \quad (3.37)$$

şeklinde dir. Daha sonra U işlemcisi kontrollü olarak uygulanmaktadır. Böylece ;

$$\begin{aligned} \xrightarrow{C-U} \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|\psi\rangle + |1\rangle U|\psi\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|\psi\rangle + e^{-2\pi i \phi} |1\rangle|\psi\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{-2\pi i \phi} |1\rangle)|\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.38)$$

elde edilir. Ancak şekil 2.2’de görüldüğü gibi bitleri sırayla çıkarabilmek için U işlemcisinin $U^{2^{k+1}}$ şeklinde kuvvetleri uygulanmalıdır. Bitleri çıkarabilmek için alınan faz sonuçları bir sonraki işlem için girdi olarak kullanılır. Bunun için ilk kubite $R_z(\omega_k)$ dönüşü uygulanır. Burada $\omega_k = -2\pi(0.0\phi_{k+1}\phi_{k+2} \dots \phi_m)$ şeklindedir ve ω_k açısına geri besleme açısı da denilmektedir. Böylece her bir bit deterministik olarak çıkarılabilir.

Şekil 3.8’ye göre ölçümden hemen önce ilk kubite hadamard dönüşümü uygulanarak faz, standart bazlarda gözlenebilir bir hale dönüşür. Ancak bu çalışmada ölçüm, NMR çift algılama ile yapılacağından zaten $|0\rangle, |1\rangle$ halleri arasındaki bağıl faz farkı direkt olarak okunabilmektedir [126].

3.5 Simülasyondan Bilgi Elde Etme

Kuantum bilgisayarda simülasyon yapmak tek başına yeterli değildir. Simülasyon sonucu işe yarar bilgi de edinilmelidir. Bu basamakta, elde edilen $|\psi(t)\rangle$ haline uygulanacak bir ölçüm ile halin tek bir öz duruma çökmesi yani kuantum mekaniğindeki ölçme problemi ortaya çıkmaktadır [1]. Genellikle simülasyon sonucu sistemin hali $|\psi(t)\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} c_i |\phi_i\rangle$ şeklinde her bir öz durumun süperpozisyonu şeklinde olacaktır. Bir kere $|\psi(t)\rangle$ durumu elde edilirse sistemin herhangi bir öz durumda bulunma olasılığı

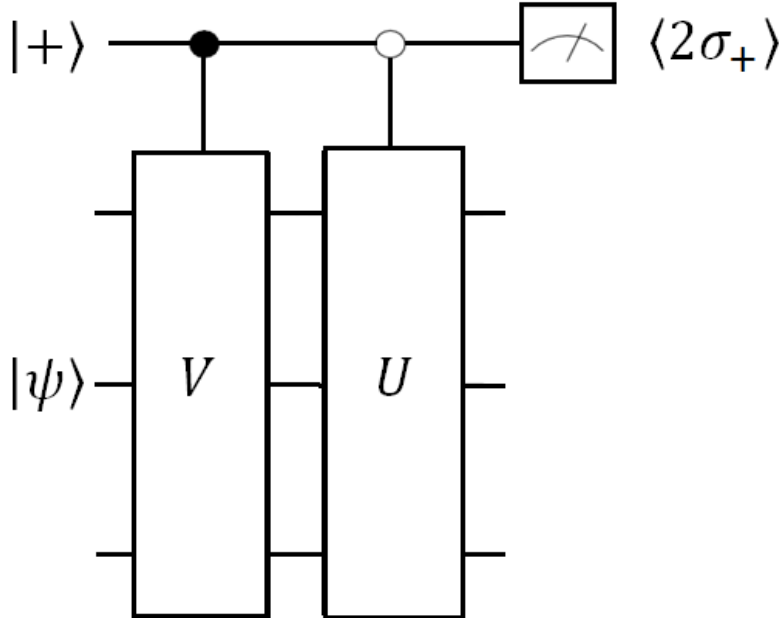
$$|c_i|^2 = |\langle \phi_i | \psi(t) \rangle|^2 \quad (3.39)$$

şeklinde elde edilir.

Diğer yandan söz konusu bir kuantum sisteminde merak edilen, $|\psi(t)\rangle$ 'yi bulmaktansa ilgilenilen bir gözlenebilirin $\langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle$ şeklindeki beklenen değeridir [127]. Bu beklenen değer kuantum simülasyon amaçlı

$$C_{AB}(t) = \langle A(t) B(0) \rangle \quad (3.40)$$

korelasyon fonksiyonu yardımıyla hesaplanabilir [128]. Korelasyon fonksiyonu yardımıyla beklenen değeri elde etmenin yolu öncelikle beklenen değeri bulunacak gözlenebilirini $A(t)$, $B(0)$ şeklinde ayrıştırmaktır.



Şekil-3.9: Ek kubit katkılı çıktı okuma algoritması. Ek kubitin $\langle 2\sigma_x \rangle$ beklenen değeri okunarak $\langle \psi | U^\dagger V | \psi \rangle$ değeri hesaplanabilir [128]

Burada $A = A(0), B = B(0)$ pek çok üniter işlemcinin toplamı olarak yazılabilen işlemciler olup $A(t) = e^{iHt}A(0)e^{-iHt}$ şeklindedir. Kısacası söz konusu gözlenebilirin beklenen değeri $\langle U^\dagger V \rangle$ formunda hesaplanmaktadır. Bunun için simule edilecek sisteme yeni bir kubit ekleyerek sadece bu kubit üzerinde yapılacak bir $\langle 2\sigma_x \rangle$ ölçümüyle sistemin hali bozulmadan sonuca gidilebilir. Şekil-3.9'da ek kubit yardımıyla simule edilen sistemin hali bazında bir gözlenebilirin beklenen değerini veren kuantum algoritma görülmektedir. Şekilde kontrollü işlemcilerin içi dolu kontrol nodu işlemcinin $|1\rangle$ haline, içi boş kontrol nodu ise işlemcinin $|0\rangle$ haline uygulanacağını belirtmektedir. İlgilenilen gözlenebilirin beklenen değerinin $\langle 2\sigma_x \rangle$ ölçümü ile nasıl yapıldığı aşağıdaki gibi açıklanabilir.

Öncelikle sisteme $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ halinde, ρ_a yoğunluk matrisli ek (ancilla) kubit eklenir. Şekil-3.9'da görüldüğü gibi $U_1 = |0\rangle\langle 0| \otimes U + |1\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1}$ ve $U_2 = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes V$ işlemleri uygulanır. Daha sonra

$$2\sigma_+^a = \sigma_x^a + i\sigma_y^a = 2|0\rangle\langle 1| \quad (3.41)$$

işlemcisiyle beklenen değer

$$\langle \sigma_x^a + i\sigma_y^a \rangle_{\rho_a \otimes \rho} = 2Tr(\bar{U}^\dagger |0\rangle\langle 1| \bar{U} \rho_a \otimes \rho) \quad (3.42)$$

şeklinde hesaplanır. Burada $\bar{U} = U_1, U_2$ şeklindedir. \bar{U} değeri son denklemde yerine konursa

$$\langle \sigma_x^a + i\sigma_y^a \rangle = Tr(|0\rangle\langle 1| \otimes U^\dagger V \rho_a \otimes \rho) = Tr(U^\dagger V \rho) = \langle U^\dagger V \rangle \quad (3.43)$$

elde edilir. Çoğu kez beklenen değeri hesaplanmak istenen gözlenebilir, sistemin hamiltoniyeni gibi hermityen bir işlemcidir. Bu durumda beklenen değer

$$\langle U(t) \rangle = \sum_{n=0}^{N-1} |c_n|^2 e^{-i\lambda_n t} \quad (3.44)$$

şeklinde hesaplanabilir. Burada $U(t) = e^{-iHt}$, hamiltoniyenin yürütücü işlemcisi, λ_n ise özdeğerlerdir. Eşitlik (3.42), kuantum mekaniğinde bilinen $\langle \hat{H} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 E_n$ beklenen değeriyle aynıdır. Bu eşitlik, herhangi bir sistem için hamiltoniyenin beklenen değerinin her bir özdeğerdeki enerjilerin ağırlıklı toplamına eşit olduğunu söyler. Fakat eşitlik (3.44)'deki beklenen değerin sonlu sistemler için hesaplandığına dikkat edilmelidir.

O halde bir kuantum bilgisayar bu kesimde anlatılan ek kubit çıktı okumalı yöntem ile sistem hamiltoniyenin beklenen değerini Şekil-2.4'teki algoritma ile hesaplayabilir. Ancak bunun için eşitlik (3.43)'te verilen bağıntıda $V = U(t)$ ve $U = \mathbb{1}$ alınmalıdır [128]. Böylece zamana bağlı $S(t) = \langle \sigma_x^a + i\sigma_y^a \rangle = \langle 2\sigma^+(t) \rangle$ fonksiyonları yardımıyla ayrık t_i değerler

kümesi için c_n özdeğerleri, prensipte ayrık kuantum Fourier dönüşüm uygulanarak elde edilebilir. Burada her bir $S(t_i)$ değerinin belirlenmesi için ayrı bir deney gerekmektedir.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışma, kuantum simülasyon amaçlı deneysel ve teorik çalışmaları ve sonuçlara ilişkin tartışmaları kapsamaktadır. Deneysel ve teorik çalışmalar ‘prensipten kanıt’ çalışmaları olup simülasyon metot ve materyallerin ayrıntılı ve açık ortaya konmasından dolayı literatüre bu metotların daha iyi bir anlayışının geliştirilmesi açısından katkıda bulunmaktadır.

İlk bölümde sadece köşegen terimler içeren hamiltoniyene sahip harmonik titreşicinin taban durum enerjisi 2 kubitlik bir NMR kuantum bilgisayar kullanılarak deneysel olarak hesaplanmıştır. Hesaplama iteratif faz tahmin algoritması kullanılmış olup sistemin taban durumu adyabatik durum hazırlama (ASP) kullanılarak simule edilmiştir. Deneysel olarak 2 kubitlik kuantum hafıza olarak d-6 asetonda çözülmüş ^{13}C etiketli kloroform molekülü kullanılmıştır. NMR kuantum hesaplama yapılabilmesi için gerekli olan saf durumlar uzaysal toplam metodu ile hazırlanmış olup değişken puls alanları kullanılmıştır.

İkinci bölümde etilen molekülü $2p-\pi$ elektronları sistemi taban durumu simülasyonu önceki bölümdeki tekniklerle fakat teorik olarak gerçekleştirilmiştir. 2 kubitlik NMR kuantum bilgisayarı Matlab programı ile simule edilmiştir.

Üçüncü bölümde yine teorik olarak fakat bu kez kuantum dijital simülasyon örneği olarak tek parçacık problemi tek boyutlu bazı sistemlerde yürütülmüştür. Bunun için tek parçacık için kinetik ve potansiyel enerji terimleri elde edilip evrensel bir kuantum bilgisayar ile hamiltoniyeni belli potansiyel engeller altında simule edilmiştir.

4.1 Harmonik Titreşken Taban Durum Simülasyonu

Çalışmada, kuantum harmonik titreşkenin taban durum enerjisinin iki kubitlik kuantum bilgisayarında kuantum simülasyon ile hesaplanması öngörüldüğünden simule edilecek sistemin hamiltoniyeni belirlenmelidir. İki kubitte gerçekleştirilen deneydeki kubitlerden ilki ölçümün yapılacağı ‘sonda kubit’, simülasyonun gerçekleştirileceği diğer kubit ise ‘sistem kubit’ olarak adlandırılmaktadır. Simülasyon tek kubitte yürütüleceğinden kuantum harmonik osilatörün hamiltoniyeni iki seviyeli bir sistem olarak seçilmiştir. Buna göre hamiltoniyen, $\hbar\omega = 1$ olmak üzere;

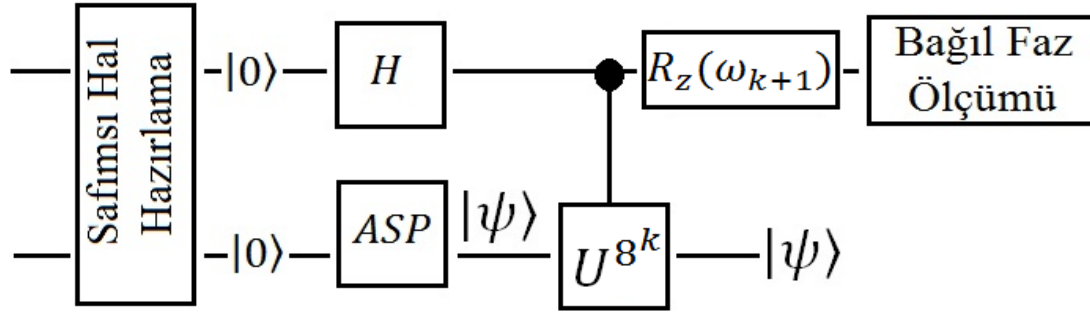
$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1/2 & \\ & 3/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega}{2} |0\rangle\langle 0| + \frac{3\hbar\omega}{2} |1\rangle\langle 1| = (\mathbb{1} - \frac{1}{2}\sigma_z) \quad (4.1)$$

şeklindedir. Burada $|0\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_z)$ ve $|1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \sigma_z)$ şeklinde ifade edilebilir.

Burada matrisin köşegen elemanları harmonik titreşkenin taban ve birinci uyarılmış durumdaki enerjileri olmak üzere taban durum enerjisi

$$E_0 = 0,5 \quad (4.2)$$

şeklindedir. Deneyin uygulaması Şekil 4.1'deki gibi yapılmıştır.



Şekil-4.1 :IPEA'nın NMR uygulaması. Şekilde iki seviyeli kuantum harmonik osilatörün NMR kuantum simülasyon ile taban durum enerjisini iteratif şekilde hesaplayan devre görülmektedir

Deneydeki safımsı haller $|00\rangle\langle 00|$ şeklinde hazırlanmış olup uzaysal ortalama metodu kullanılmıştır. Safımsı hallerin hazırlanışı bölüm (3.3.2)'de verilmiştir. Kuantum hafıza olarak kullanılan kloroform ($^{13}\text{CHCl}_3$) molekülü için hamiltoniyen $\hat{H} = \omega_I \hat{I}_z + \omega_S \hat{S}_z + 2\pi J \hat{I}_z \hat{S}_z$ şeklindedir. Burada I ^1H çekirdeğini, S ise ^{13}C çekirdeğini temsil etmekte olup ω_I ve ω_S bu çekirdeklere karşılık gelen Larmor frekansları ve J ise bu çekirdekler arasındaki skaler çiftlenim sabitini belirtmektedir.

4.1.1 Adyabatik durum hazırlama

Simülasyonun gerçekleşeceği kubitin durumu uygulanacak işlemcinin öz durumunda bulunmalıdır. O halde sistem kubit, harmonik titreşkenin taban durumunda hazırlanmalıdır. Adyabatik süreçler kullanılarak bu durum elde edilebilir. Adyabatik hamiltoniyenin gelişimi deneysel uygulama amacına uygun olarak

$$\hat{H} = H_0(1 - s_m) + s_m H_f \quad (4.3)$$

şeklinde ifade edilmektedir. Burada H_0 ilk hamiltoniyen, H_f son hamiltoniyen, $s_m = \frac{m}{M}$, M toplam adım sayısı ve $m = 0,1,2,\dots$ şeklindedir.

Öncelikle adyabatik durumun şartlarından biri olan enerji farkını oluşturmak için kubit hali süperpoze edilmelidir. Deneyde bu durum $R_y(-90^\circ)$ dönüşü ile oluşturulmuştur. Bu dönüş z eksenindeki manyetizasyonu x eksenine indirildiğinden $H_0 = \sigma_x$ tir. H_f ise

eşitlik (4.1)'de belirtildiği gibi $H_f = -\frac{1}{2}\sigma_z$ şeklindedir. O halde taban durumun hazırlanması için kubit,

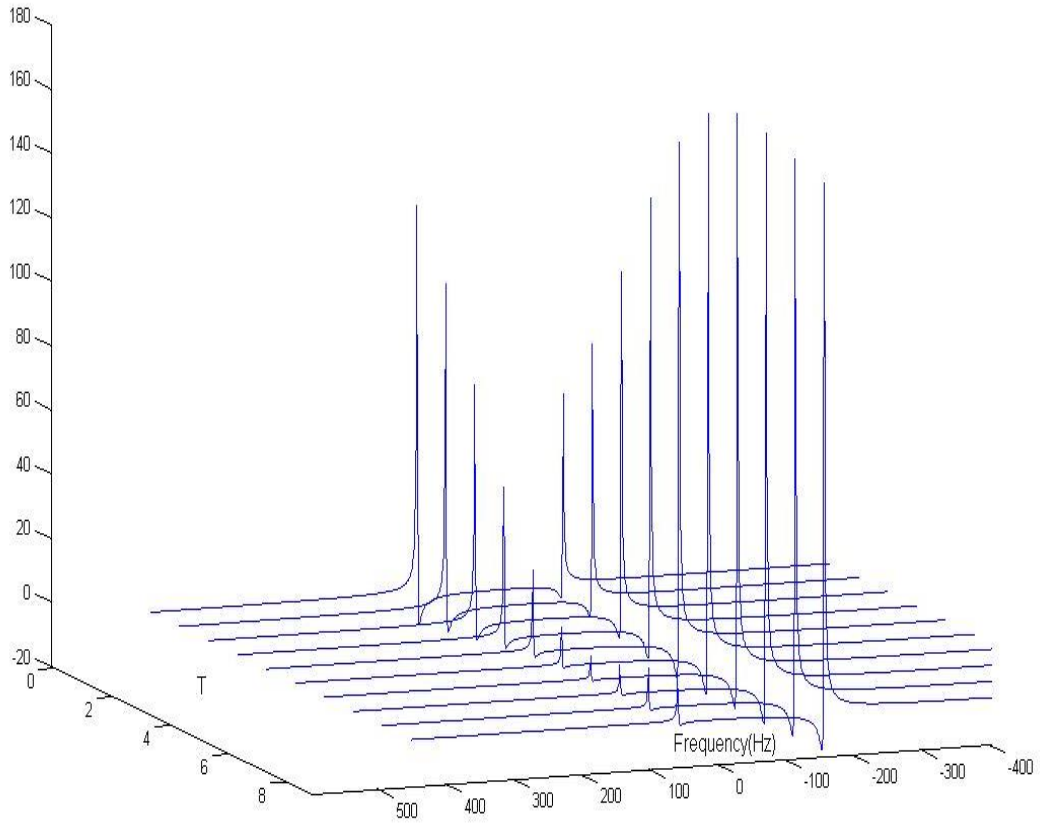
$$H^{ad} = (1 - s_m)\sigma_x - \frac{s_m}{2}\sigma_z \quad (4.4)$$

hamiltonyeni altında geliştirilmelidir. Bu hamiltonyen gelişimi pratik olarak

$$U_m = R_y(\theta_m)R_x(\delta)R_{-y}(\theta_m) \quad (4.5)$$

şeklindeki bir dönü sandviçiyle uygulanabilir [96]. Burada $\theta_m = \arctg\left(\frac{-s_m/2}{1-s_m}\right)$ ve

$\delta = \frac{T}{M+1}$ şeklinde olup T , toplam adyabatik gelişim süresidir. Burada önemli olan T süresinin optimizasyonudur. Deneyin numerik simülasyonu ile T süresi Şekil 3.3'teki gibi sınanmış ve $T = 5.6$ a.u. şeklinde optimum değeri elde edilmiştir.



Şekil-4.2:Sonda kubitinin faz duyarlı NMR spektrumu. Şekilde $C - U$ işleminden sonra farklı t değerleri için simule edilmiş spektrum görülüyor

Öte yandan deneyde $M=10$ seçilmiş olup δ ve θ_m değerleri derece cinsinden, $\delta = 29,1$; $\theta_m = 0 ; 3,2 ; 7,1 ; 12 ; 18,4 ; 26,5 ; 36,8 ; 49,4 ; 63,4 ; 77,4 ; 90$ ($m = 0, 1, 2 \dots$ için) şeklindedir. Adyabatik hal hazırlamanın başarılı bir şekilde uygulanmasıyla artık sistem kubitinin durumu harmonik titreşkenin taban durumudur. Aynı zamanda bu durum $\hat{U} = e^{-iHt}$ işlemcisinin de öz durumudur. Burada H , harmonik titreşkenin hamiltonyenidir. Böylece $e^{-iHt}|\psi\rangle = e^{-2\pi i\phi}|\psi\rangle$ özdeğer denklemi sağlanacaktır. Daha önceden belirtildiği gibi

burada $\varphi = e^{-2\pi i\phi}$, taban durumu ve ilk uyarılmış durum arasındaki bağıl fazdır ve NMR teknikleri ile direkt olarak okunabilir. Taban durum enerjisi ile ϕ fazı $E = 2\pi\phi/t$ şeklinde bağlıdır ve t , ϕ 'yi 0 ve 1 arasında herhangi bir değer alacak şekilde seçilmelidir [51]. Bu çalışmada $t = \pi/3$ şeklinde seçilmiş ve böylece faz,

$$\phi = 0,08\bar{3} = (0,00010101010 \dots)_{mod 2} \quad (4.6)$$

şeklinde belirlenmiştir. İki seviyeli kuantum harmonik titreşicinin hamiltonyeni $H = -\frac{1}{2}\sigma_z$ ve $t = \pi/3$ değeri dikkate alınırsa U işlemcisi

$$\hat{U} = e^{-iHt} = e^{i\frac{\pi}{6}\sigma_z} \quad (4.7)$$

şeklinde elde edilir. Bu işlem, $R_z\left(-\frac{\pi}{3}\right)$ dönüşüne karşılık gelmektedir.

4.1.2 Kontrollü işlemcinin oluşturulması

Şekil 4.1'de de görüldüğü gibi faz tahmin algoritmasında U işlemcisi ve kuvvetleri kontrollü olarak uygulanmaktadır. Denklem (4.7)'teki U işlemcisi 60 derecelik ters z dönüşüdür ve matris temsili;

$$R_z\left(-\frac{\pi}{6}\right) = \begin{pmatrix} 0,866 + 0,5i & 0 \\ 0 & 0,866 - 0,5i \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

şeklinde U işlemcisi için kontrollü U , $C - U$ için puls dizisi

$$C - U = e^{-i\frac{\pi}{12}\sigma_z^A\sigma_z^B} e^{i\frac{\pi}{12}\sigma_z^B} \quad (4.9)$$

şeklinde hesaplanmıştır [129]. Yukarıda görüldüğü gibi bu işlem, B kubitinde bir z dönüşü ve her iki kubitinde belli bir süre skaler çifttenim hamiltonyeni altında gelişiminden ibarettir.

Bu gelişim süresi $t = \frac{\pi}{6J} = 0,775$ ms'dir. Öte yandan diğer terim olan $e^{i\frac{\pi}{12}\sigma_z^B}$ dönüşü ise

$e^{i\frac{\pi}{12}\sigma_z^B} = R_z\left(-\frac{\pi}{6}\right) = R_x\left(\frac{\pi}{2}\right)R_y\left(-\frac{\pi}{6}\right)R_x\left(-\frac{\pi}{2}\right)$ şeklinde kompozit yürütülebilir. Eşitlik (4.9)'daki $C - U$ işlemcisinin matris temsili

$$C - U = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 0,866 + 0,5i & 0 \\ & & 0 & 0,866 - 0,5i \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

şeklinde U işlemcisi.

Bu sonucun biraz daha ayrıntılı olarak elde edilmesi aşağıdaki şekilde özetlenebilir. U işlemcisi

$$C - U = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbb{1} + \frac{i}{2}\sigma_z\right) \quad (4.11)$$

şeklinde kontrollü olarak yazılabilir. Burada E_+ ve E_- ilkel idempotentler olmak üzere;

$$|0\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_z) = E_+ \quad \text{ve} \quad |1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \sigma_z) = E_- \quad (4.12)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Öte yandan E_+ ve E_- işlemcileri :

$$\begin{aligned} E_+ + E_- &= 1 & (E_\pm)^2 &= E_\pm \\ E_+ E_- &= 0 & e^A E_\pm + E_\mp &= e^{AE_\pm} \end{aligned} \quad (4.13)$$

eşitliklerini sağlamaktadır [129]. O halde eşitlik (4.11) için

$$C - U = E_+ \otimes \mathbb{1} + E_- \otimes \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbb{1} + \frac{i}{2} \sigma_z \right) = E_+^A + E_-^A \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbb{1}^B + \frac{i}{2} \sigma_z^B \right) \quad (4.14)$$

yazılabilir. (4.13) eşitlikleri yardımıyla son ifade

$$C - U = \left[-i \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbb{1} + \frac{i}{2} \sigma_z^B \right) E_-^A + E_+^A \right] [i E_-^A + E_+^A] \quad (4.15)$$

şeklinde yazılabilir. Bundan sonra $\mp i = e^{\mp i \frac{\pi}{2}}$ ve $e^A E_\pm + E_\mp = e^{AE_\pm}$ bağıntıları eşitlik (4.15)'da kullanılırsa ;

$$\begin{aligned} C - U &= e^{(-i \frac{\pi}{2} + i \frac{\pi}{6} \sigma_z^B) E_-^A} e^{i \frac{\pi}{2} E_+^A} = \exp \left\{ i \pi \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{6} \sigma_z^B \right) \frac{1}{2} (1 - \sigma_z^A) \right\} \exp \left\{ i \frac{\pi}{2} \frac{1}{2} (1 - \sigma_z^A) \right\} \\ &= e^{-i \frac{\pi}{4}} e^{i \frac{\pi}{12} \sigma_z^B} e^{i \frac{\pi}{4} \sigma_z^A} e^{-i \frac{\pi}{12} \sigma_z^A \sigma_z^B} e^{i \frac{\pi}{4}} e^{-i \frac{\pi}{4} \sigma_z^A} \end{aligned} \quad (4.16)$$

elde edilir. Son ifade daha sade bir şekilde yazıldığında kontrollü U işlemcisinin puls dizisi

$$C - U = e^{-i \frac{\pi}{12} \sigma_z^A \sigma_z^B} e^{i \frac{\pi}{12} \sigma_z^B} \quad (4.17)$$

şeklinde elde edilmiş olur.

4.1.3 Deney

DeneySEL olarak hesaplanmak istenen taban durumu enerjisi eşitlik (4.6)'daki gibi ϕ fazı ile kodlandığından $\phi = \frac{\varphi}{2\pi}$ fazı deneySEL olarak elde edilmelidir. Burada $0, \phi_1 \phi_2 \phi_3 \dots \phi_m$, ϕ fazının ikili sistemde karşılık gelen bitleri olmak üzere onluk sistemdeki karşılığı

$$(\phi)_{mod10} = \frac{2^{m-1} \phi_1 + 2^{m-2} \phi_2 + \dots + 2^0 \phi_m}{2^m} \quad (4.18)$$

şeklindedir. $C - U$ işlemcisinden sonra sistemin hali ;

$$\xrightarrow{C-U} \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{-2\pi i (0, \phi_1 \phi_2 \phi_3 \dots \phi_m)} |1\rangle) |\psi\rangle \quad (4.19)$$

şeklindedir. Burada amaç, $0, \phi_1 \phi_2 \phi_3 \dots \phi_m$ bitlerini iteratif işlemlerle deneySEL olarak elde etmektir. Bu yüzden $C - U$ işlemcisinin kuvvetleri uygulanmıştır. Bu çalışmada deney başına 3 bit elde etmek öngörülmüştür. Bu yüzden denklem (3.15)'teki $C - U$ işlemcisi

$$C - U^{8^k} = e^{-i8^k \frac{\pi}{12} \sigma_z^A \sigma_z^B} e^{i8^k \frac{\pi}{12} \sigma_z^B} \quad (4.20)$$

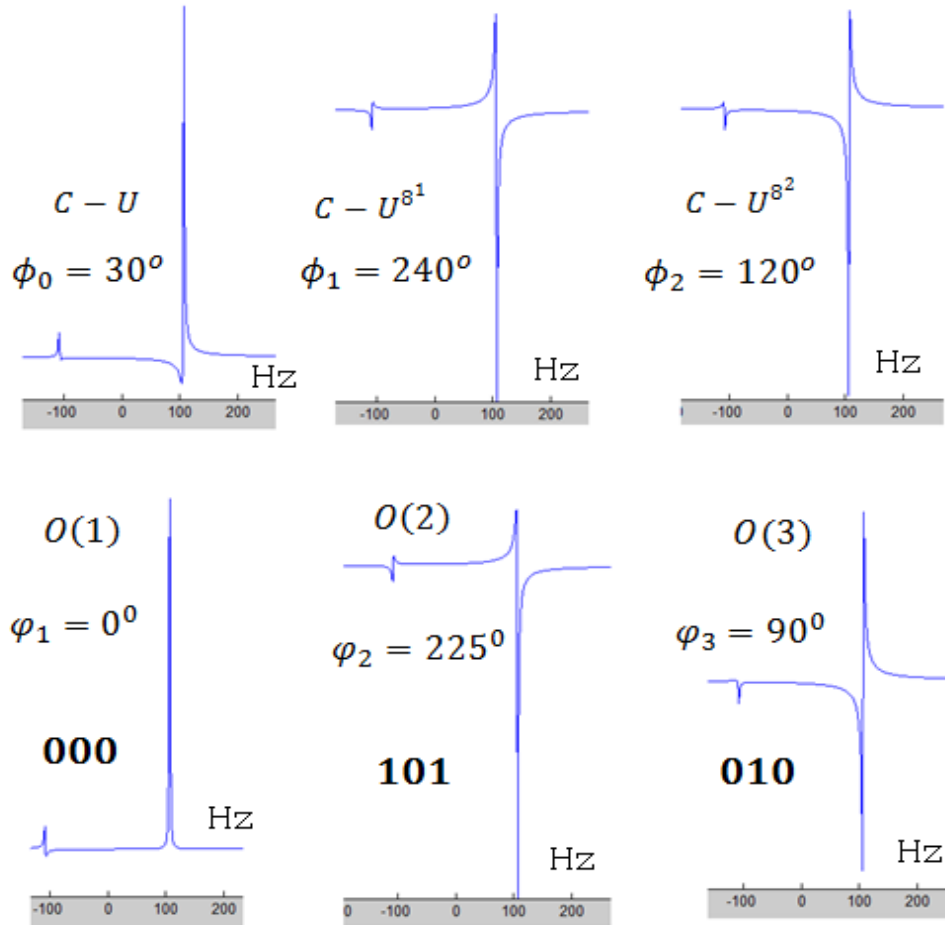
şeklinde uygulanmıştır. Örneğin $k = 0, k = 1$ ve $k = 2$ için elde edilen faz değerleri

$$\begin{aligned} k = 0 ; C - U &\rightarrow \varphi_0, \phi_0 = \frac{\varphi_0}{2\pi} = 0, \phi_1 \phi_2 \phi_3 \dots \phi_m \\ k = 1 ; C - U^8 &\rightarrow \varphi_0, \phi_0 = \frac{\varphi_0}{2\pi} = 0, \phi_4 \phi_5 \phi_6 \dots \phi_m \\ k = 2 ; C - U^{8^2} &\rightarrow \varphi_0, \phi_0 = \frac{\varphi_0}{2\pi} = 0, \phi_7 \phi_8 \phi_9 \dots \phi_m \end{aligned} \quad (4.21)$$

şeklinindedir. Ancak amaçlanan, her iterasyonda takip eden 3 biti elde etmek olduğundan

$$O(k) = e^{2\pi i(2^{-3} \phi_k)} C - U^{8^{k-1}} \quad (4.22)$$

işlemi uygulanmıştır. Görüldüğü gibi k . deney için $(k - 1)$. deneyin sonucuna ihtiyaç vardır. Bu yüzden öncelikle deneyde denklem (4.20)'deki kontrollü işlemcilerin kuvvetleri uygulanarak sonuçlar alınmış, daha sonra bu sonuçlar kullanılarak denklem (4.22)'deki işlemlerle bitler deneysel olarak elde edilmiştir.



Şekil-4.3: $O(k)$ işlemi sonrası faz duyarlı NMR spektrumu

Safımsı hal sinyali referans sinyal alınarak $C - U^{8^k}$ ve $O(k)$ işlemleriyle numerik simülasyonla elde edilen faz duyarlı NMR spektrumları, karşılık gelen faz açıları çıkarılan bit değerlerinin bazıları Şekil 4.3'te verilmiştir. Deneyle, oda sıcaklığında, Bruker-AV-500 MHz ticari spektrometre ile yapılmış olup daha önce belirtildiği gibi numune olarak d-6 aseton çözeltisi ile ^{13}C etiketli kloroform molekülü kullanılmıştır.

Deney, proton ve karbon kanal olmak üzere iki kanalda yapılmış olup ölçüm sonucu faz duyarlı NMR spektrumu alınması suretiyle proton kanalda yapılmış, kuantum simülasyon ise karbon kanalında yürütülmüştür. Termal dengeye ait proton kanal referans sinyaline ait pikler 4,5 ve 5 ppm'de elde edilmiştir. Deneysel sonuçlara ait açılar ve çıkarılan bitler Çizelge-4.1'te tablolastırılmıştır. Yapılan deneyler ile nümerik simülasyondan elde edilen sonuçlar tamamen uyum içindedir.

Çizelge-4.1: İterasyonlar sonucu elde edilen bit değerleri. Burada farklı iterasyonlar ve bu işlemler sonucu ikili algılamada elde edilen NMR spektrumundaki faz kayma değerleri her bir iterasyonda elde edilen üçer bit değerleri verilmiştir.

İterasyon	Faz	Bitler
$O(1)$	0^0	0,000
$O(2)$	225^0	0,000101
$O(3)$	90^0	0,000101010
$O(4)$	225^0	0,00010101010101
$O(5)$	90^0	0,0001010101010101010
$O(6)$	225^0	0,000101010101010101010101

Çizelge-4.1'e göre 6 iterasyon sonucu elde edilen 18 bit ;

$$\phi = 0,000101010101010101 \quad (4.23)$$

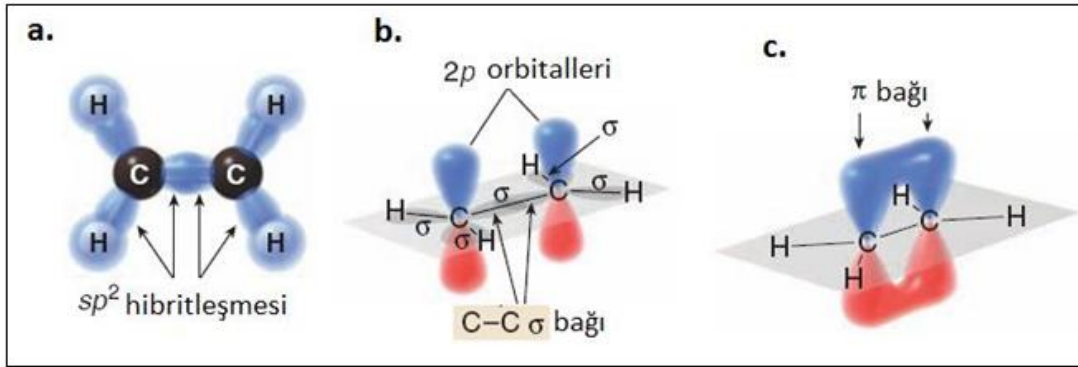
şeklindedir. Bu sonucun ondalık tabandaki eşiti eşitlik (3.33)'te yerine konduğunda harmonik titreşkenin taban durumuna ait enerji değeri

$$E = 0,4999926 \quad (4.24)$$

şeklinde elde edilmiştir.

4.2 Etilen 2p- π Elektronları Taban Durum Simülasyonu

Bu çalışma, etilen molekülü 2p orbitalleri π bağı elektronlarının konfigürasyona karşı enerjilerini veren hamiltonyenin kuantum simülasyonu ile ilgilendiğinden öncelikle simüle edilecek olan hamiltonyen kısaca açıklanmalıdır. Etilen molekülünün karbon atomları arasında biri σ , diğeri π bağı olmak üzere iki bağı bulunmaktadır. Pi bağı Şekil-4.4 c)'de görüldüğü gibi karbon atomlarının molekül düzlemine dik 2p orbitallerinin örtüşmesiyle, σ bağı ise birer sp^2 hibrit orbitalinin örtüşmesiyle oluşur.



Şekil-4.4 : Etilen molekülü a) Etilen Molekülü 2 karbon 4 hidrojen atomu içermektedir. b) Molekülün 2p orbitalleri molekül düzlemine diktir. c) İki karbon arasındaki ikinci bağı karbon atomları arasındaki 2p orbitalleri elektronlarının oluşturduğu π bağıdır [130]

Etilen molekülü 2p- π elektronları için yerleşime bağlı hamiltonyeni yazabilmek için moleküler orbitalleri belirlemek gerekmektedir. Moleküler orbitaller en genel biçimde atomik orbitallerin lineer kombinasyonu şeklinde $\psi_i(r) = \sum_{\mu=1}^K C_{\mu i} \phi_{\mu}(r)$ olarak yazılabilir. Örneğimizdeki durumda p orbitallerini temsilen ϕ_1 ve ϕ_2 atomik orbitaller simetrik kombinasyonla gerade simetride bağı ve ungerade simetride anti-bağı moleküler orbitali oluşturur. Oluşan moleküler orbitaller minimal bazlarda ;

$$\psi_1 = [2(1 + S_{12})]^{-\frac{1}{2}}(\phi_1 + \phi_2) \quad \psi_2 = [2(1 - S_{12})]^{-\frac{1}{2}}(\phi_1 - \phi_2) \quad (4.25)$$

şeklinindedir. Burada $S_{12} = \int dr \phi_1^*(r) \phi_2(r)$ örtme integralidir. Oluşan ψ_1, ψ_2 orbitallerinden 4 adet spin orbital

$$\begin{aligned} \chi_1(x) &= \psi_1(r)\alpha(\omega) & \chi_2(x) &= \psi_1(r)\beta(\omega) \\ \chi_3(x) &= \psi_2(r)\alpha(\omega) & \chi_4(x) &= \psi_2(r)\beta(\omega) \end{aligned} \quad (4.26)$$

şeklinindedir. Burada $\alpha(\omega), \beta(\omega)$ spin fonksiyonlarıdır. Böylece 2 elektron ve 4 spin orbitalle $\binom{4}{2} = 6$ farklı konfigürasyon meydana gelir. Bunlardan biri Hartree-Fock taban durumuna karşılık gelen $|\psi_0\rangle = |\chi_1\chi_2\rangle$ determinantıdır. Aslında sistemin tam dalga

fonksiyonu için $|\psi_o\rangle$ referansına göre sonsuz sayıda uyarılmış konfigürasyonun lineer birleşimi gerekir. Buna CI konfigürasyon etkileşimi denilir. Oysa pratik olarak baz seti belli bir yerde kesilmesi gerektiğinden sonlu sayıda spin orbital elde edilir. Yukarıdaki gibi $2K = 4$ spin orbital ve $N = 2$ elektron ile tamamlanmış bir baz seti oluşmaz. Buna karşın bu determinant setinden oluşan sonlu hamiltonyen matrisinin köşegenleştirilmesiyle oluşacak çözümler, 6 determinant tarafından gerilen 2 elektron alt uzayında tam çözümlerdir [130]. Bu sürece (FCI) tam konfigürasyon etkileşimi denilir.

Taban durumu dalga fonksiyonu için simetri göz önüne alındığında yukarıda belirtilen 6 determinanttan sadece ikisi ; $|\psi_o\rangle = |\chi_1\chi_2\rangle$ taban durumu determinantı ve $|\psi_{dub}\rangle = |\chi_3\chi_4\rangle$ çift uyarılmış durum işlemlerde belirir. Etilen molekülü 2p- π elektronları için Born-Oppenheimer yaklaşıklığında hamiltonyen atomik birimlerde,

$$\mathcal{H} = O_1 + O_2 = h(1) + h(2) + r_{12}^{-1} \quad (4.27)$$

şeklinde dir. Burada $h(i) = \sum_{i=1}^2(T_i + \sum_{j=1}^2 V_{ij})$ i . elektron için kor hamiltonyen , r_{12}^{-1} ise elektronlar arası coulomb potansiyelidir. Tüm bu veriler ışığında FCI hamiltonyen matrisi ;

$$H = \begin{pmatrix} \langle \chi_1\chi_2 | \mathcal{H} | \chi_1\chi_2 \rangle & \langle \chi_1\chi_2 | \mathcal{H} | \chi_3\chi_4 \rangle \\ \langle \chi_3\chi_4 | \mathcal{H} | \chi_1\chi_2 \rangle & \langle \chi_3\chi_4 | \mathcal{H} | \chi_3\chi_4 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2h_{11} + J_{11} & K_{12} \\ K_{12} & 2h_{22} + J_{22} \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

şeklinde elde edilir. Burada h_{ii} , K_{ij} ve J_{ii} sırasıyla tek elektron integralleri, değış tokuş ve coulomb integralleridir. Ayrıca bu çalışmada taban durumu ve çift uyarılmış durumu işlemsel bazlara $|\psi_o\rangle \rightarrow |0\rangle$, $|\psi_{dub}\rangle \rightarrow |1\rangle$ şeklinde haritalanmıştır.

Eşitlik (4.21)'deki hamiltonyen ve ilgili integraller değıerlendirilerek bu çalışma için gerekli FCI hamiltonyen matrisinin değıerleri atomik birimlerde aşığıdaki gibi yazılır [131].

$$H = \begin{pmatrix} -1,2627 & 0,1529 \\ 0,1529 & -0,8198 \end{pmatrix} = c_0\mathbb{1} + c_1\sigma_x + c_2\sigma_z \quad (4.29)$$

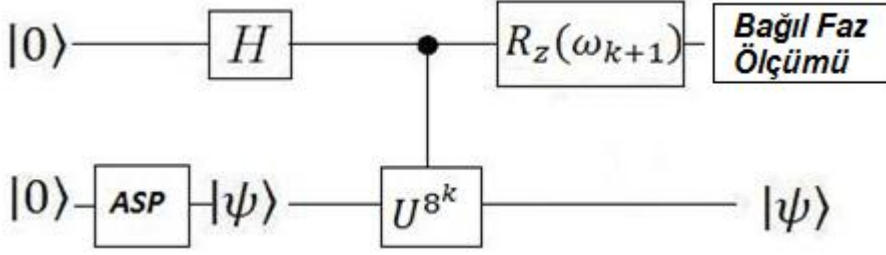
Bu matris yukarıda belirtildiğı gibi pauli işlemcileri cinsinden yazılabilmektedir. Burada $\mathbb{1}$, 2x2 boyutunda birim matristir. Etilen molekülü 2p- π elektronları taban durum enerjisinin teorik değıeri yukarıdaki hamiltonyen matrisinin köşegenleştirilmesi ile elde edilen öz değıerlerden en küçüğüdür ve -1,310 356 879 322 492 a.u. şeklindedir.

4.2.1 Algoritma ve hal hazırlama uygulamaları

Uygulamanın numerik simülasyonu Matlab paket programı tarafından yürütülmüştür. 2 kubitlik sıvı-hal NMR kuantum hafıza için hamiltonyen;

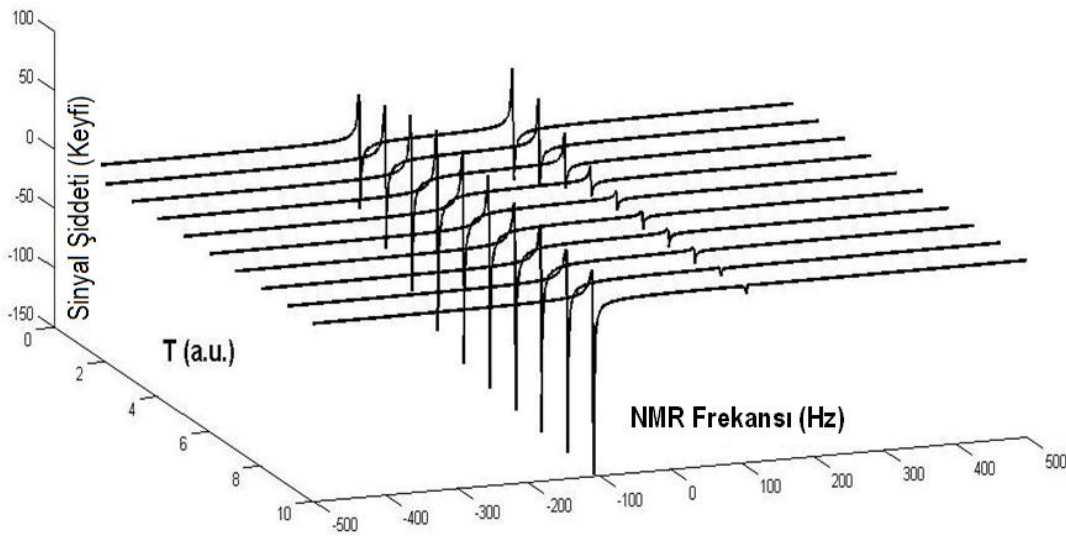
$$H = \omega^p \sigma_z^p + \omega^s \sigma_z^s + \frac{\pi}{2} J \sigma_z^p \sigma_z^s \quad (4.30)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ω^p ve ω^s sonda ve sistem kubitlere karşılık gelen çekirdeklerin Larmor frekanslarının 2π katıdır.



Şekil-4.5: Moleküler $2p-\pi$ etilen için IPEA. Moleküler $2p-\pi$ etilen molekülü taban durum enerjisi hesaplayan IPEA algoritması görülmektedir

Skaler çiftlenim sabiti $J = 215 \text{ Hz}$ seçilerek heteronükleer kloroform molekülüne [114,116] denklik sağlanmıştır. Öngörülen deneyin NMR kuantum simulatörü ile yürütülmesi Şekil-3.1'deki gibi uygulanabilir. Deney, bir safımsı hal olan $\Delta\rho_{00} = |00\rangle\langle 00|$ haline karşılık gelen sapma yoğunluk matrisi ile başlamaktadır. Daha sonra bir sahte hadamard dönüşü sonda kubitte $R_y(\frac{\pi}{2})$ dönüşü ile uygulanmış ve bir ters $R_y(\frac{\pi}{2})$ dönüşüde sistem kubitte uygulanarak ASP sürecinin başlamasına neden olmuştur. Böylece sistemin başlangıç hamiltonyeni $H_0 = \sigma_x$ ve problem hamiltonyende $c_0\mathbb{1}$ ihmal edilmek üzere $H_f = c_1\sigma_x + c_2\sigma_z$ şeklindedir. ASP'nin deneyde yürütülmesi $U_m^{ad} = R_y(\theta_m)R_x(\beta)R_y(-\theta_m)$ dönü sandviçi ile üçlü işlemci çarpımı şeklinde yürütülmüştür. Burada $\theta_m = \text{tg}^{-1}[(s_m c_2)/(1 - s_m + c_1 s_m)]$ ve $\beta\alpha \frac{T}{M+1}$ şeklindedir. Şekil- 4.6'da belirtildiği gibi toplam adyabatik süre için optimum değer $T = 5 \text{ a.u.}$ şeklinde seçilmiştir.



Şekil-4.6: Sonda kubitin faz duyarlı NMR spektrumu. Sonda kubitin CU işlemcisinin ardından farklı T süreleri için elde edilen spektrumları görülmektedir. $T = 5$, adyabatik gelişim için optimum süre olarak seçilmiştir

4.2.2 Taban durum enerjisinin elde edilmesi

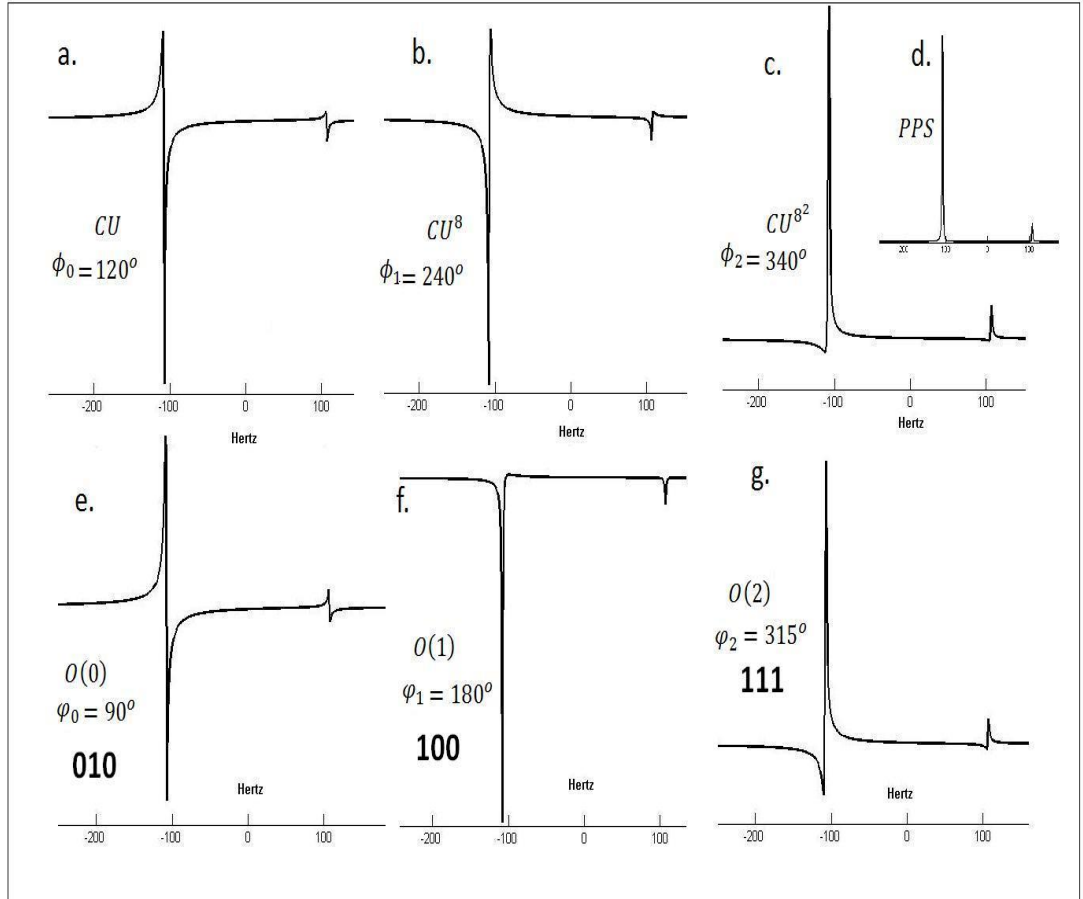
Önceki çalışmada olduğu gibi iterasyon başına 3 bit çıkarılması öngörülmesi ve iterasyonlar virgülden hemen sonraki bitlerden başlamış, sonraki bitlere doğru ilerlemiştir. Bu durumda iterasyonlar $k = 0$ 'dan başlamakta ve $U = e^{-iHt}$ işlemcisi U^{8^k} şeklindeki bir kontrollü işlemci olarak uygulanmaktadır.

Kontrollü işlemcinin NMR puls dizisi işlemci formunda bölüm 4.1.2'deki metotlarla

$$CU^{8^k} = e^{-i8^{k\frac{\pi}{4}}c_1\sigma_x^s} e^{i8^{k\frac{\pi}{4}}c_2\sigma_z^s} e^{i8^{k\frac{\pi}{4}}c_1\sigma_z^p\sigma_x^s} e^{-i8^{k\frac{\pi}{4}}c_2\sigma_z^p\sigma_z^s} \quad (4.31)$$

şeklinde elde edilmiştir. Dizide bulunan üçüncü terim NMR pulsarı cinsinden uygulanabilirlik açısından $e^{i8^{k\frac{\pi}{4}}c_1\sigma_z^p\sigma_x^s} = e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_y^s} e^{i8^{k\frac{\pi}{4}}c_1\sigma_z^p\sigma_z^s} e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_y^s}$ şeklinde uygulanmalıdır [129].

Algoritmanın son basamağı fazların ölçümüdür. Bir faz duyarlı NMR spektrumu iki hal arasındaki faz kaymasını okuyabilir. Faz farkları, bit bilgilerinin NMR spektrumundaki faz kaymaları ile direk elde edilebildiği NMR interferometresi ile elde edilmiştir.



Şekil-4.7 : $O(k)$ işleminin sonrası faz duyarlı NMR spektrumu. **a-c)** CU ve CU işlemcilerinin bazı kuvvetlerinin ardından alınan bağımlı fazlar. **d)** Tüm faz ölçümleri için referans faz olarak seçilen safimsiz NMR spektrumu. **e-f)** İlk 3 iterasyon sonucu çıkarılan bitler

CU ve CU işlemlerinin bazı kuvvetlerinin ardından elde edilen bağıl faz kaymalarının derece cinsinden değerleri ve bazı iterasyonlar sonucu elde edilen bitler Şekil-4.7’de verilmiştir. İterasyonlar;

$$O(k) = R_z(\omega_{k+1})CU^{8^k} \quad (4.32)$$

şeklinde formüle edilmiş olup $\omega_{k+1} = -2^{-3}\phi_{k+1}$ ve ϕ de sadece kontrollü işlemcilerin kuvvetleri ile elde edilmiş bağıl fazlardır. İterasyonlar $k = 0$ ’ dan başlamış olup çıkan bit değerlerini taşıyan bağıl fazlar ϕ_k şeklinde gösterilmiştir.

Çıkarılan ikili sayı sistemindeki bitler onluk biçimde (3.33) nolu denkleme konursa taban durum enerjisi elde edilmiş olur. Örneğin 6 iterasyon için elde edilen faz $\phi = 0,010100111101110011$ olup $E = -1,310\ 348\ 510\ 742$ a.u. değerine karşılık gelmektedir. Bu değer teorik olarak hesaplanan taban durum enerjisiyle 4 bitlik bir tutarlılığı vardır. Ancak biraz daha çok sayıda iterasyonla tutarlılık artabilir hatta prensip olarak tam değere ulaşılabilir. Fakat gerçek bir deneyde simülasyon süreci deneysel hatalarla sınırlanmıştır [48].

4.3. Tek Boyutlu Model Kuantum Sistemi Dijital Simülasyonu

Bu çalışmada tek boyutlu kuantum sistemlerden sonlu kalınlıktaki bir potansiyel engel incelenmiş ve tek parçacık için parçacığın her iki yanında bulunma olasılıkları ele alınmıştır. Ayrıca yine tek parçacık için tek ve periyodik potansiyel engeller altında sistemin farklı ilk durumlarına karşı $\langle U(t) \rangle$ beklenen değerini hesaplayan kuantum algoritma geliştirilmiştir. Bunun için parçacığın bir kuantum bilgisayar ile dijital kuantum simülasyonu gerçekleştirilmiş, buna uygun 2 ve 3 kubitlik algoritmalar tasarlanmıştır. Algoritmalar içinse öncelikle 2 ve 3 kubitlik kinetik ve potansiyel enerji işlemcileri tasarlanmıştır.

4.3.1 İki kubitlik kinetik enerji teriminin oluşturulması

Kinetik enerji terimi momentum uzayında tanımlı olup $e^{-iK\Delta t}|p_j\rangle$ şeklinde uygulanmaktadır. Burada $|p_j\rangle = |j_1 j_2 \dots j_n\rangle$ olup momentum temsilinde s tane kubit temsil etmekte ve $e^{-iK\Delta t} = e^{-i\frac{p_j^2}{2m}\Delta t}$ şeklindedir. Görüldüğü gibi kinetik enerji teriminin hesaplanması için momentum teriminin karesi hesaplanmalıdır. Eşitlik (2.98)’de belirtildiği gibi parçacığı temsil eden durum vektörü tek boyutlu ve sonlu bir aralıktaki yer temsilinde tanımlandığından n kubitte temsil edilen ve $N = 2^n$ parçaya ayrılan $-d \leq x \leq d$ aralığı ($d = 1/2$) için sırasıyla yer ve momentum temsilleri :

$$x_k = \frac{k}{N_s} - \frac{1}{2} \quad \text{ve} \quad p_j = 2\pi(j - \frac{N_s}{2}) \quad (4.33)$$

şeklinde tanımlanabilir. Böylece $\alpha = -(2\pi N_s)^2 \Delta t / 2$ olmak üzere kinetik enerji işlemcisinin uygulaması

$$e^{-iK\Delta t} |p_j\rangle = e^{i\alpha(\frac{j}{N_s} - \frac{1}{2})^2} |p_j\rangle \quad (4.34)$$

şeklini alır. İki kubitlik durum ve $\Delta t = 0.01$ için $\alpha = -0.32\pi^2$ alınmıştır. Ayrıca ikili sayı sisteminde

$$\frac{j}{N_s} = 0.j_1j_2 \dots j_n = \frac{j_1}{2} + \frac{j_2}{2^2} + \dots + \frac{j_n}{2^n} = \sum_{n=1}^s j_n \cdot 2^{-n} \quad (4.35)$$

yazılabileceğinden bu sonuç (4.27) nolu denklemde yerine konmalıdır. Böylece eşitlik (4.35)'de üstel ifadedeki kareli terim :

$$\left(\frac{j}{N_s} - \frac{1}{2}\right)^2 = \left(\sum_{n=1}^s j_n 2^{-n}\right)^2 - \sum_{n=1}^s j_n 2^{-n} + 1/4 \quad (4.36)$$

şeklini alır. Son eşitliğin sağ tarafındaki son terimden $e^{i\alpha/4}$ gelip bu global bir faz faktörüdür. İkinci terimin kubitler üzerine etkisi $e^{-i\alpha(\frac{j_1+j_2}{2})} |j_1j_2\rangle$ şeklinde olup bu işlem her bir kubit üzerine uygulanan $R_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}$ mantık kapısıdır. Burada $\theta = (-\alpha \cdot 2^{-n})$ şeklindedir. Eşitlik (4.29)'daki toplamın karesi şeklinde olan ilk terim ise açık olarak

$$\left(\frac{j_1}{2} + \frac{j_2}{2^2}\right)^2 = \left(\frac{j_1}{2}\right)^2 + \left(\frac{j_2}{2^2}\right)^2 + 2\frac{j_1}{2}\frac{j_2}{2^2} \quad (4.37)$$

şeklinde yazılabileceğinden

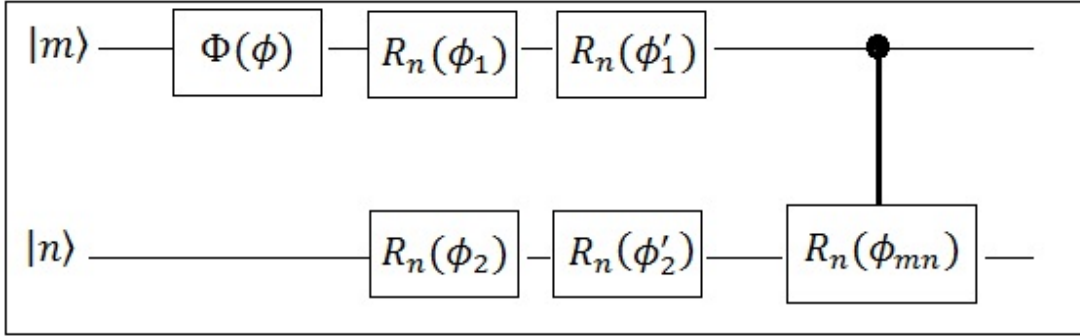
$$\exp\{i\alpha(\sum_{n=1}^s j_n 2^{-n})^2\} = \exp\{(i\alpha \sum_n j_n^2 2^{-2n} + 2i\alpha \sum_{m,n} j_m j_n 2^{-m-n})\} \quad (4.38)$$

şeklindedir. Son eşitliğin sağ tarafındaki üstel terimin ilk elemanı $j_n^2 = j_n$ olduğundan bu terimin temsil ettiği işlemci (her bir j_n 0 ve 1'lerden oluşmaktadır) daha önce belirtilen R_n işlemcisidir. Üstel terimin ikinci elemanı $j_m j_n$ çarpımı içerdiğinden bu işlem ancak $j_m = j_n = 1$ olduğunda $e^{2i\alpha 2^{-m-n}}$ dönüşümü uygulamakta ve diğer tüm durumlarda hiçbir şey yapmama işlemcisine eşit olmaktadır. Bu kontrollü bir mantık kapısı tanımına uyduğundan bu elemanı temsil eden mantık kapısı

$$C - R_{mn} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & e^{2i\alpha 2^{-m-n}} \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

şeklindedir.

Tüm bu veriler ışığında iki kubitlik kinetik enerji işlemcisinin devre şeması Şekil-4.8'de çizilmiştir.



Şekil-4.8: iki kubitlik kinetik enerji işlemcisi için devre şeması. Kinetik enerji işlemcisi tek kubitlik faz kapıları ve bir kontrollü faz kapısından oluşmaktadır. Burada $\alpha = -0,32\pi^2$, $\phi = \frac{\alpha}{4}$, $\phi_1 = -\alpha 2^{-1}$, $\phi_2 = -\alpha 2^{-2}$, $\phi'_1 = \alpha 2^{-2}$, $\phi'_2 = \alpha 2^{-2}$, $\phi'_2 = \alpha 2^{-4}$ ve $\phi_{mn} = 2\alpha 2^{-3}$ şeklindedir

4.3.2 Üç Kubitlik kinetik enerji teriminin oluşturulması

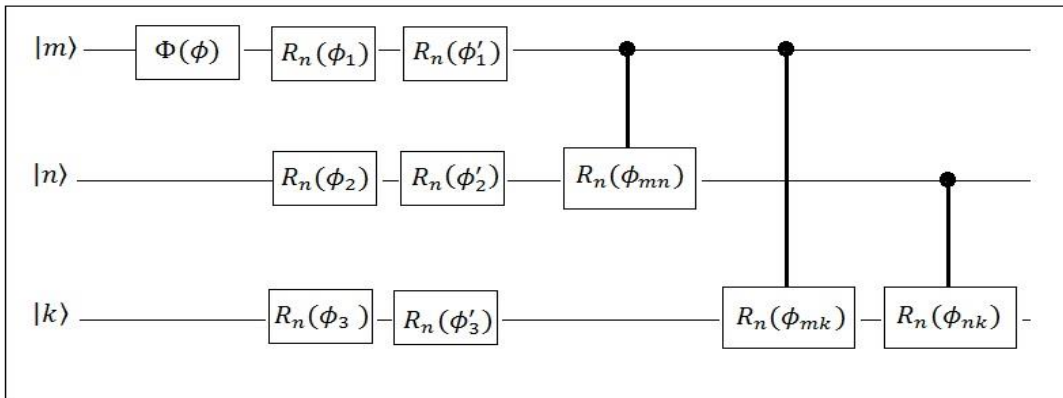
Üç kubitlik kinetik enerji terimi yukarıda ayrıntısıyla anlatılan iki kubitlik terimin üç kubitte genişletilmiş halidir. Eşitlik (4.29)'daki toplamın karesi şeklinde olan terim üç kubit durumunda açılarak incelendiğinde

$$\left(\frac{j_1}{2} + \frac{j_2}{2^2} + \frac{j_3}{2^3}\right)\left(\frac{j_1}{2} + \frac{j_2}{2^2} + \frac{j_3}{2^3}\right) = \left(\frac{j_1}{2}\right)^2 + \left(\frac{j_2}{2^2}\right)^2 + \left(\frac{j_3}{2^3}\right)^2 + 2\frac{j_1 j_2}{2 \cdot 2^2} + 2\frac{j_1 j_3}{2 \cdot 2^3} + 2\frac{j_2 j_3}{2^2 \cdot 2^3} \quad (4.40)$$

şeklinde olduğu görülmektedir. Bu durumda

$$\begin{aligned} \exp\{i\alpha(\sum_{n=1}^s j_n 2^{-n})^2\} &= \exp\{(i\alpha \sum_n j_n^2 2^{-2n} + 2i\alpha \sum_{m,n} j_m j_n 2^{-m-n} \\ &+ 2i\alpha \sum_{m,k} j_m j_k 2^{-m-k} + 2i\alpha \sum_{n,k} j_n j_k 2^{-n-k})\} \end{aligned} \quad (4.41)$$

şeklinde yazılabilir. Bu eşitlik incelendiğinde üç kubitlik durumda üç tane kontrollü

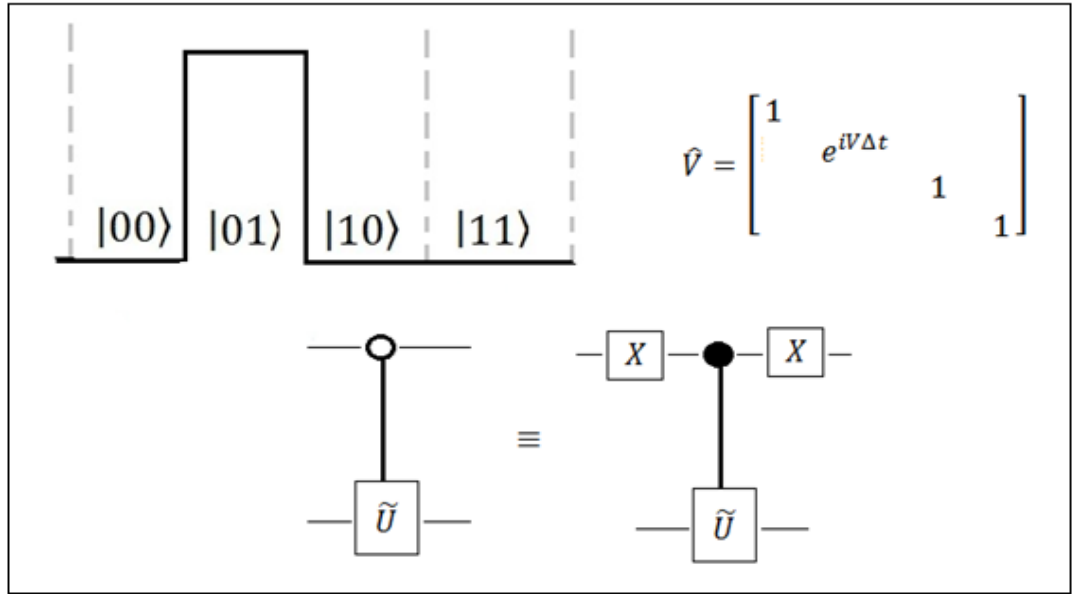


Şekil-4.9 :Üç kubitlik kinetik enerji işlemcisi için devre şeması. Kinetik enerji işlemcisi tek kubitlik faz kapısı. Kinetik enerji işlemcisi tek kubitlik faz kapıları ve üç tane kontrollü faz kapısından oluşmaktadır. Burada $\alpha = -1,28 \pi^2$, $\phi = \frac{\alpha}{4}$, $\phi_1 = -\alpha 2^{-1}$, $\phi_2 = -\alpha 2^{-2}$, $\phi_3 = -\alpha 2^{-4}$, $\phi'_1 = \alpha 2^{-2}$, $\phi'_2 = \alpha 2^{-4}$, $\phi'_2 = \alpha 2^{-8}$, $\phi_{mn} = 2\alpha 2^{-3}$, $\phi_{mk} = 2\alpha 2^{-4}$ ve $\phi_{nk} = 2\alpha 2^{-5}$ şeklindedir

faz kapısı olduğu görülmektedir. Üç kubitlik durumda kinetik enerji işlemcisinin devre sembolü Şekil-4.9'daki gibi elde edilmiştir.

4.3.3 Potansiyel enerji terimlerinin oluşturulması

Potansiyel enerji terimi yer temsilinde köşegen bir terimdir. Çalışmada öncelikle iki kubit durumunda tek potansiyel engeli, sonra ise üç kubit durumunda periyodik potansiyel engelleri seçilmiştir. İki kubitlik durumda potansiyel işlemcisinin $|01\rangle$ durumunda $V|01\rangle = e^{iV\Delta t}$ işlemini yaptığı, diğer durumlarda ise herhangi bir işlem yapmadığı varsayalım. Bu durum uzayın $|01\rangle$ bölgesine bir potansiyel engeli konulmasına denktir. Bu duruma ait potansiyel engeli, matris temsili ve ilgili devre sembolü Şekil-4.10'daki gibidir.



Şekil-4.10 : İki kubitlik sistem için potansiyel enerji işlemcisi için devre şeması. Devre sembolündeki \tilde{U} işlemcisi \hat{V} işlemcisinin alt uzayını geren 2×2 'lik matris temsiline sahip üniter bir işlemcidir. Şekilde ayrıca işlemcinin matris temsili de görülmektedir

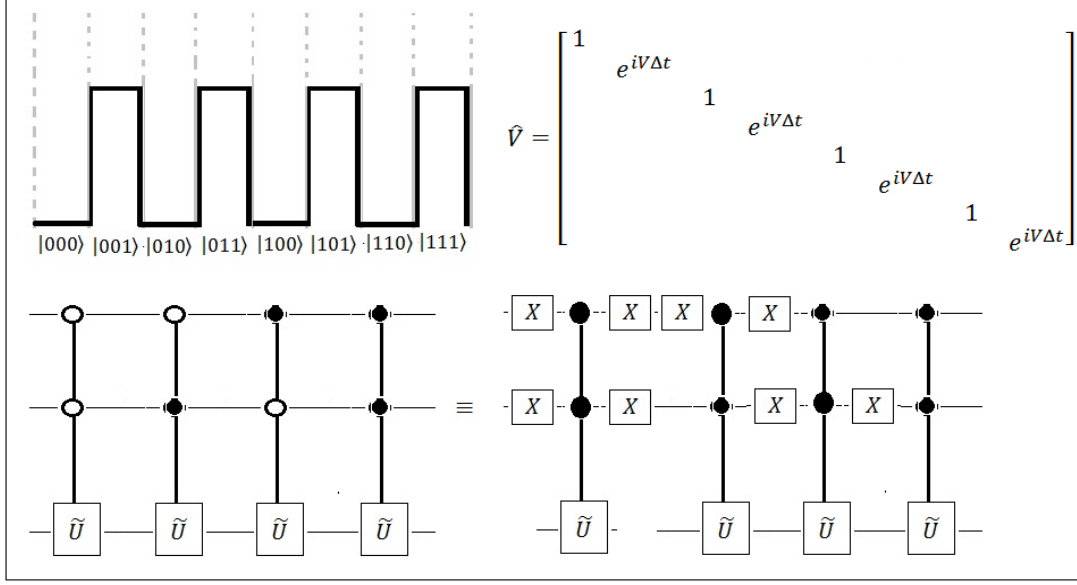
Bu durumda \hat{V} işlemcisinin matris temsili ayrışımı

$$V = |0\rangle\langle 0| \otimes \tilde{U} + |1\rangle\langle 1| \otimes \mathbb{1} \quad (4.42)$$

şeklinde ve $\tilde{U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{iV\Delta t} \end{pmatrix}$ şeklindedir. Öte yandan $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ pauli- x matrisi olmak üzere $X|0\rangle = |1\rangle$ eşitliği kullanılarak son eşitlik, (2.56-57) eşitliklerinde açıklandığı gibi

$$V = X|1\rangle\langle 1|X \otimes \tilde{U} + X|0\rangle\langle 0|X \otimes \mathbb{1} = (X \otimes \mathbb{1})(|0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes \tilde{U})(X \otimes \mathbb{1}) \quad (4.43)$$

şeklinde yazılarak Şekil-4.10'daki devre sembolü doğrulanmış olur. Ayrıca bu çalışmada periyodik bir potansiyel üç kubitlik bir sistemde temsil edilmiştir.



Şekil-4.11 : Üç kubitlik potansiyel enerji işlemcisi için devre şeması. Potansiyel işlemcisinin matris temsili 8×8 'lik köşegen bir matristir. Potansiyel teriminin devre sembolü düzgün-kontrollü işlemcilerin ard arda uygulanmasıyla elde edilebilir.

Şekil-4.11'de görüldüğü gibi, \tilde{U} daha önce belirtilen 2×2 'lik bir matris olmak üzere ;

$$V = |00\rangle\langle 00| \otimes \tilde{U} + |01\rangle\langle 01| \otimes \tilde{U} + |10\rangle\langle 10| \otimes \tilde{U} + |11\rangle\langle 11| \otimes \tilde{U} \quad (4.44)$$

şeklinde dir. Bu köşegen temsil ;

$$\begin{aligned} V &= (|00\rangle\langle 00| \otimes \tilde{U} + |01\rangle\langle 01| \otimes \mathbb{1} + |10\rangle\langle 10| \otimes \mathbb{1} + |11\rangle\langle 11| \otimes \mathbb{1}) \\ &\times (|00\rangle\langle 00| \otimes \mathbb{1} + |01\rangle\langle 01| \otimes \tilde{U} + |10\rangle\langle 10| \otimes \mathbb{1} + |11\rangle\langle 11| \otimes \mathbb{1}) \\ &\times (|00\rangle\langle 00| \otimes \mathbb{1} + |01\rangle\langle 01| \otimes \mathbb{1} + |10\rangle\langle 10| \otimes \tilde{U} + |11\rangle\langle 11| \otimes \mathbb{1}) \\ &\times (|00\rangle\langle 00| \otimes \mathbb{1} + |01\rangle\langle 01| \otimes \mathbb{1} + |10\rangle\langle 10| \otimes \mathbb{1} + |11\rangle\langle 11| \otimes \tilde{U}) \end{aligned} \quad (4.45)$$

şeklinde çarpanlara ayrılabilir.

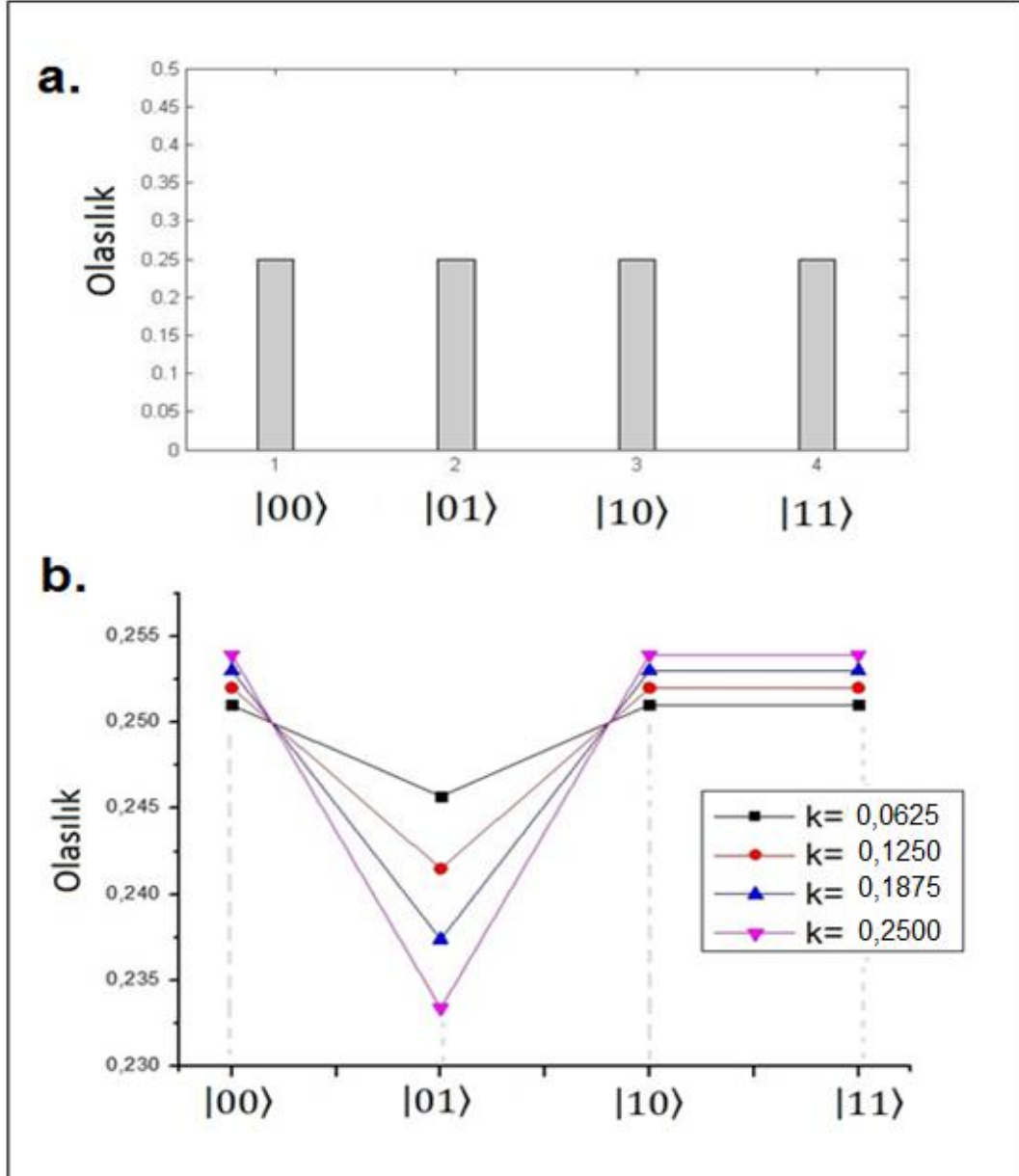
Eşitlik (4.45)'deki ilk çarpım terimi ilk iki kubit 0 iken, ikinci çarpım terimi ilk kubit 0 , ikincisi 1 durumunda iken, üçüncü çarpım terimi ilk kubit 1, ikincisi 0 iken son terimse ilk iki kubitte 1 iken \tilde{U} işlemcisinin uygulanacağını söylemektedir. Bu durumda V işlemcisi 3 kubitlik düzgün kontrollü işlemciler cinsinden çarpanlara ayrılarak Şekil-4.11'deki gibi devre sembolü çizilmiştir.

4.3.4 Uygulama ve sonuçlar

Daha öncede belirtildiği gibi kuantum simülasyonda amaç $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$ halini elde etmektir. Geliştirilen matris temsilleri ile algoritma hesaplamaları Matlab programı ile yapılmıştır. Sistemin gelişimini simule eden ve yürüten $U(t)$ işlemcisi $M = \frac{t}{\Delta t} = 100$ parçaya bölünmüş ve işlemci $U(\Delta t)$ 100 defa ilk hale uygulanarak $U(t)$ işlemcisi elde edilmiştir. Simülasyon algoritması eşitlik (2.93)'teki algoritma ile 2 ve 3 kubitlik durumlar

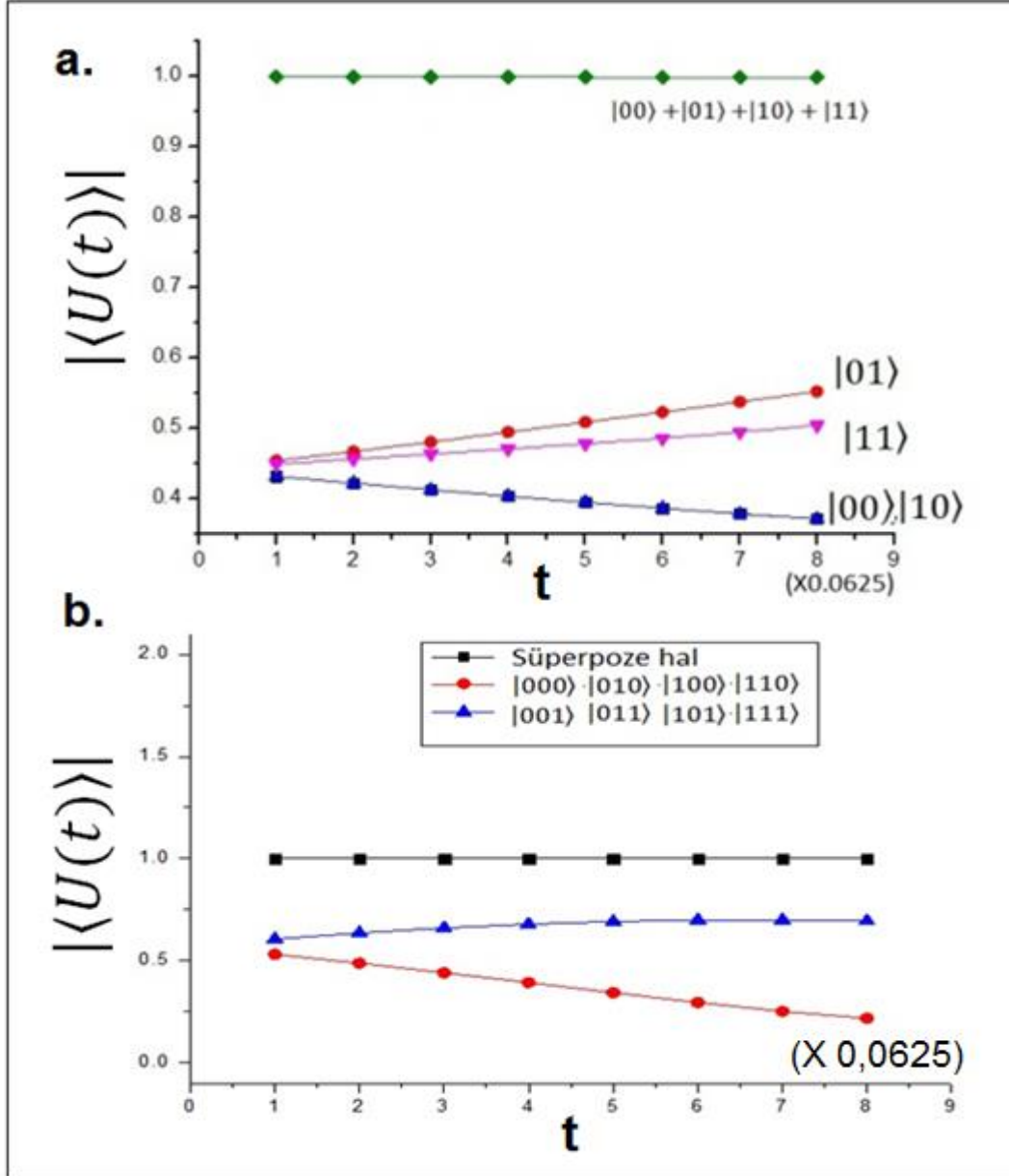
için yürütülmüş ve bu algoritmayı oluşturan T, V, QFT işlemcilerinin 2 ve 3 kubitlik temsilleri farklı ilk durumlara uygulanmıştır.

Öncelikle 2 kubitlik durumda sisteme $U(t)$ işlemcisi uygulandıktan sonra sistemin her bir özdurumda bulunma olasılığı (3.39) nolu denklem ile hesaplanmıştır. Burada sistemin ilk durumu $H \otimes H|00\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$ şeklinde hazırlanmıştır. İlk uygulamada hiçbir potansiyel engel kullanılmadan sadece kinetik enerji işlemcisi ile $U(t)$ uygulanmış ve her bir öz durumda bulunma olasılığı Şekil-4.12'deki gibi elde edilmiştir.



Şekil-4.12 :2 kubitlik sistemin farklı öz durumlarda bulunma olasılığı **a)** Süperpoze şekilde hazırlanan ilk durumda potansiyel terim yokken her bir öz durumda bulunma olasılıkları 0,25 şeklinde elde edilmiştir. **b)** Farklı büyüklükteki engellerine karşı sistemin her bir öz durumda bulunma olasılıkları. Burada k ayarlanabilir bir parametre olup potansiyel engelin şiddeti ile ilişkilidir.

Potansiyel enerji işlemcisi olan $\hat{V} = e^{iVt}$ için $V = 2\pi t$ seçilmiştir. Burada t , $0 \leq t \leq 1$ aralığında olup sonlu genişlik ve yükseklikteki V potansiyel engelinin genliğini ayarlamaktadır. Şekil 4.13'te görüldüğü gibi potansiyel engelin şiddeti arttıkça parçacığın, engelin bulunduğu $|01\rangle$ öz durumunda bulunma olasılığı giderek azalmakta ve diğer bölgede bulunma olasılıkları sıfırdan farklı elde edilmektedir. Yine 2 kubit durumunda hesaplanan bir diğer nicelik eşitlik (3.40)'ta belirtilen korelasyon fonksiyonları yardımıyla $U(t)$ işlemcisinin beklenen değeridir. Bu değer eşitlik (3.44)'te belirtildiği gibi enerjinin tüm öz durumlar üzerinden ağırlıklı toplamını vermektedir.



Şekil-4.13:3kubitlik sistem için $|\langle U(t) \rangle|$ sonucu. a) 2 kubitlik durumda Farklı büyüklükteki potansiyel engeline karşı farklı ilk durumlara göre $U(t)$ işlemcisinin beklenen değerleri. b) 3 kubitlik durumda periyodik potansiyel altında süperpoze hal ve farklı ilkdurumlara ait enerjinin ağırlıklı toplamına ait sonuçlar

Şekil-4.13’de farklı ilk durumlara karşı, farklı şiddette potansiyel engele karşı enerjinin ağırlıklı toplamının mutlak değerinin nasıl değiştiği görülmektedir. Bu sonuç Şekil-3.9’da belirtilen algoritma uygulanarak elde edilmiştir. Aynı algoritma 3 kubitlik durum için Şekil-4.11’de belirtilen periyodik potansiyel içinde uygulanmış olup sonuçlar Şekil-4.12 b)’teki gibidir. Hem Şekil-4.12 a) hem de Şekil-4.12 b)görüldüğü gibi enerjinin tüm öz durumlar üzerinden ağırlıklı toplamı farklı öz durumlara ait ilk hallerde değişirken süperpoze ilk durumlarda potansiyel engelin şiddetinin değişmesi enerjinin ağırlıklı toplamını değiştirmemektedir.

4.4. Jahn-Teller Sistemi Kuantum Simülasyon Algoritması

Bu bölümde fiziksel sistem olarak Jahn-Teller (JT) sistemi seçilmiş, sistemin özellikleri ve hamiltoniyeni göz önüne alınarak bu sistemle ilgili bir kuantum simülasyon algoritması geliştirilmiştir. Hermann Jahn ve Edward Teller, doğrusal olmayan çok atomlu moleküllerdeki simetri kırılmalarını incelemişler ve çekirdek titreşimlerinin ihmal edilemeyecek ve molekül simetrisini bozacak kadar çok olduğu durumlarda elektronik seviyelerdeki dejenereliğin kalktığını ortaya çıkarmışlardır [125]. Konuyla ilgili günümüze kadar pek çok araştırma yapılmıştır [66,126].

Jahn-Teller etkisi olarak da bilinen bu olay vibrasyonik modların elektronik seviyelere etkilerini incelemekte ve grup teorisinin kimyasal uygulamaları bakımından çok iyi bir örnek teşkil etmektedir [126-127]. Dejenere elektronik terimler (Γ) ve bununla etkileşen vibrasyonik modlar γ_i , $\Gamma \otimes (\gamma_1 + \gamma_2 + \dots)$ problemleri olarak adlandırılan sistemleri oluşturmaktadır [126]. Örneğin çift kat dejenere bir elektronik seviye E ile temsil edilmekte ve bu seviye dejenere olmayan JT-aktif yer değiştirmelere sahipse bu durum $E \otimes b_1$, $E \otimes b_2$ veya $E \otimes (b_1 + b_2)$ problemi, çift kat dejenere e JT-aktif yer değiştirmesine sahipse $E \otimes e$ problemi olarak adlandırılmaktadır. Bu problemler JT- etkisini belli elektronik seviyeler ile çiftlenmiş, belli serbestlik derecelerine sahip tek boyutlu ya da çok boyutlu kuantum harmonik titreşken sistemler olarak modellenmektedir.

4.4.1 Açık kuantum sistem olarak JT sistemi

Genel olarak kuantum sistemler asla tam olarak çevreden izole edilemezler. Bu durumda kuantum sistemlere açık kuantum sistemler denilir. Açık kuantum sistemlerinde klasik bilgisayarlarca simülasyonu ‘zor’ sınıfına girmektedir. Simule edilecek sisteme ek olarak sistemle etkileşen ‘çevre’ büyük serbestlik derecesine sahip ek bir sistem olarak Hilbert uzayını daha da büyütmektedir. Genel olarak çevreyle etkileşen bir açık kuantum sistemden oluşan bir global sistemin hamiltoniyeni

$$H = H_s + H_e + H_I \quad (4.46)$$

şeklinde verilir. Burada H_S, H_ε, H_I sırasıyla açık kuantum sistemin, çevrenin ve çevre ve açık kuantum sistem arasındaki etkileşim hamiltoniyenleridir. Etkileşim hamiltoniyeni genel olarak $H_I = \sum_i A_i \otimes B_i$ şeklinde yazılabilir. Burada A_i ve B_i sırasıyla açık sistem ve çevre sistemlerinin durum uzaylarına etki eden işlemcilerdir.

İdeal olarak, açık bir kuantum sistem dinamiği, açık sistemi çok sayıda parçacığa sahip bir çevre sistemle etkileştirip bir süre gelişime izin vermek ve açık sistem üzerinden ölçüm yapmaktır. Fakat pratikte dijital bir kuantum bilgisayar ancak sınırlı sayıda kubitte sahip olduğundan büyük serbestlik derecelerine sahip çevre sistemlerle etkileşen açık sistemlerin simülasyonu için farklı teknikler gereklidir [128]. Büyük çevre sistemler için açık kuantum sistemin çevre üzerine etkisi ihmal edilebileceğinden global sistem iyi bir yaklaşıklıkla

$$\rho(t) \cong \rho_s(t) \otimes \rho_\varepsilon^{th} \quad (4.47)$$

şeklinde bir tensör çarpımı ile temsil edilebilir. Burada $\rho_s(t)$ açık sistem yoğunluk matrisi, ρ_ε^{th} ise termal durumda çevre sistemi yoğunluk matrisidir. Termal durum çevre sistemi

$$\rho_\varepsilon^{th} = \sum_j P_j |j\rangle\langle j|, j = 1, \dots, L = 2^d \quad (4.48)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $P_j = \frac{e^{-\beta E_j}}{Z}$, $\beta = 1/k_B T$, k_B Boltzman sabiti, T sıcaklık, Z üleşim fonksiyonudur. Öte yandan denklemdeki E_j ve $|j\rangle$ çevre hamiltoniyeni H_ε 'nin özdeğer ve özvektörleridir. Çevre kubitleri arasında etkileşim olmadığı varsayımı altında $\rho_\varepsilon^{th} = \rho_1^{th} \otimes \rho_2^{th} \otimes \dots \otimes \rho_n^{th}$ şeklinde yazılabilir. Böylece açık kuantum sistem, etkileşimsiz çok parçacıklı bir çevre sistem havuzuna batırılmış gibi düşünülerek eşevresizlik etkiler incelenebilir [129].

Bu çalışmada $E \otimes b$ problemini temsil eden JT sistemi bir açık kuantum sistem olarak kabul edilmiş, 2-kat dejenere elektronik sistem, tek bir kubitte temsil edilen açık kuantum sistem olarak; tek boyutlu kuantum harmonik titreşici ise 2 kubitte temsil edilen çevre sistem olarak haritalanmıştır. $E \otimes b$ problemi için JT hamiltoniyeni

$$H = \frac{1}{2}\omega_s\sigma_z + \left[\frac{p^2}{2} + \frac{\omega_\varepsilon^2 X^2}{2}\right] + \lambda X \otimes \sigma_x \quad (4.49)$$

şeklinde ifade edilebilir [130,131]. Bu hamiltoniyen denklem (4.46) formunda olup hem açık kuantum sistem hem de çevreyi ifade eden global sistem hamiltoniyenidir ve komüte etmeyen işlemcilere sahiptir. Bu yüzden bu hamiltoniyenin bir kuantum algoritmada uygulanabilmesi için yürütücü işlemcisi Trotter bağıntısı yardımıyla

$$U(t) = \exp(-iHt) = \lim_{n \rightarrow \infty} [e^{-iH_s t/n} \cdot e^{-iH_\varepsilon t/n} \cdot e^{-iH_I t/n}]^n \quad (4.50)$$

şeklinde yazılmalıdır.

4.4.2 $E \otimes b$ JT sistemi kuantum simülasyon algoritması

Denklem (4.49)'da ω_s ve ω_ε , 2 seviyeli açık kuantum sistemi ve çevre modlarını temsil eden frekanslar, σ_z ve σ_x Pauli matrisleridir. Denklemdeki ilk iki terim yerel hamiltoniyenler olup sırasıyla açık kuantum sistem ve çevre uzaylarına uygulanmaktadır. Son terim ise açık kuantum sistem ile çevre arasındaki etkileşim hamiltoniyeni olup λ , etkileşimin genliğini belirten bir katsayıdır. Sistem hamiltoniyeninde titreşken çevre modları açıklayan 2. Terimdeki P ve X , sırasıyla momentum ve konum işlemcileridir. Momentum terimini içeren kinetik enerji teriminin yürütücü işlemcisi için denklem (4.39) ve Şekil-4.8'de oluşturulan 2 kubitlik uygulama kullanılabilir. Titreşken modları açıklayan hamiltoniyenin potansiyel enerji teriminin yürütücü işlemcisi ise kinetik enerji işlemcisi ile aynı formdadır. Burada $U_V = e^{-i\frac{V}{2}\Delta t}$ formunda olan potansiyel enerji işlemcisi

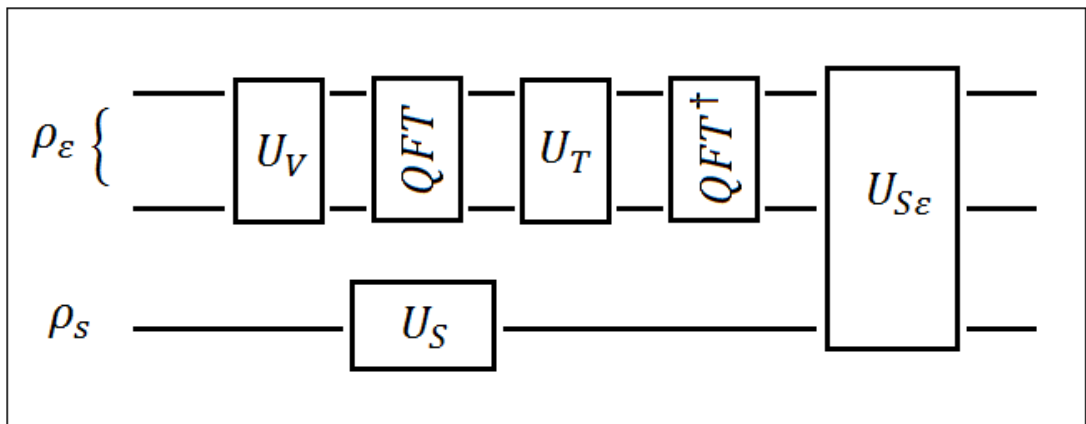
$$U_V = e^{-i\frac{\omega_\varepsilon^2 X^2}{4}\Delta t} \quad (4.51)$$

şeklinde olup $\gamma = -\frac{\omega_\varepsilon^2}{4}\Delta t$ olmak üzere $U_V = e^{-i\gamma X^2}$ şeklinde yazılabilir.

Denklem (4.49)'deki etkileşim terimi olan son terimde $X \otimes \sigma_x$ çarpımı olup bu durum X işlemcisinin matris temsilini 2 kubitlik durumda açıkça oluşturulmasını gerektirmektedir. X işlemcisinin 2 kubitlik durumda matris temsili (4.33) denklemi yardımıyla

$$X = \begin{pmatrix} -1/2 & & & \\ & -1/2 & & \\ & & 0 & \\ & & & 1/4 \end{pmatrix} \quad (4.52)$$

şeklinde oluşturulmuştur. Tüm bu veriler ışığında global sistemi temsil eden yürütücü işlemin devre sembolü Şekil-4.14'deki gibi oluşturulmuştur.



Şekil-4.14: $E \otimes b$ JT problemini simule eden kuantum devre şeması. Bu devre $U(t) = \exp(-iHt)$ işlemcisini uygulamakta olup $U_V = e^{-iV\Delta t'}$, $U_T = e^{-iK\Delta t'}$, $U_S = e^{-i\omega_s\sigma_z t'}$ ve $U_{S\varepsilon} = e^{-i\lambda X\sigma_x t'}$ formundadır. Burada $t' = t/n$ şeklinde olup n , pratikte büyük fakat sonlu bir sayıdır. Trotter bağıntısının doğrulanması için bu işlemciler $\rho_s \otimes \rho_\varepsilon$ sistemine n kez uygulanmalıdır

Denklem (4.49)'de kinetik enerji işlemcisi P dışında tüm terimler yer temsilinde köşegendir. Bu yüzden $U_T = e^{-iK\Delta t'}$ işlemcisi uygulanırken 2 kubitlik kuantum fourier dönüşümü işlemcisi ile uygulanan bir benzerlik dönüşümü ile yer temsilinde köşegen haline getirilmiştir. Daha öncede belirtildiği gibi çevre sistem 2 kubit olarak uygulanmış ve karşılık gelen yoğunluk matrisi $\rho_\varepsilon = |++\rangle\langle ++|$ şeklindedir. Açık kuantum sistemi tek bir kubitte temsil edilmiş olup karşılık gelen yoğunluk matrisi $\rho_s = |+\rangle\langle +|$ şeklindedir. Burada $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ olup $|0\rangle$ saf durumuna uygulanabilecek basit bir H işlemcisi ile elde edilebilir.

Bu kesimde sunulan kuantum simülasyon algoritmasından yararlı bilgi elde etmek için Şekil-4.14'deki 3 kubitlik global sisteme bölüm 3.5'te anlatıldığı gibi ek bir kubit eklenerek ilgilenilen bir gözlenebilirin beklenen değeri elde edilebilir. Yalnız bu durumda açık kuantum sistem ρ_s değil, global sistem $\rho_{s\varepsilon}$ ile ilgili bilgi elde edilmiş olur. Bir kısmi iz işlemi global sisteme simülasyon sonunda $\rho_s(t) = \text{tr}_\varepsilon(U(t)\rho_s(0) \otimes \rho_\varepsilon U(t)^\dagger)$ şeklinde uygulanarak açık kuantum sistemle ilgili bilgi elde edilebilir.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

5.1 Sonuçlar

Bu çalışma kuantum bilgi teorisi ve kuantum hesaplamaların temel motivasyon kaynağı olan kuantum simülasyon konusunda deneysel ve teorik uygulamalar içermektedir. Kuantum simülasyonda günümüze kadar gelen çalışmalar, kuantum simülasyonu 2 ana sınıflandırmaya ayırmıştır. Bunlardan biri bir kuantum sistemi başka bir kuantum sistem kullanarak simüle etme, diğeri ise bir kuantum sistemi evrensel bir kuantum bilgisayar kullanarak simüle etme (dijital kuantum simülasyon) şeklindedir. İlk sözü edilen sınıflandırma çalışmanın bölüm 4.1 ve 4.2’de uygulanan kısmını kapsamakta, bölüm 4.3 ve 4.4’te ise dijital kuantum simülasyon uygulamaları verilmektedir.

Çalışmanın deneysel kısmını oluşturan 4.1 bölümünde NMR teknikleri kuantum hesaplama metodu olarak benimsenmiş ve uygulanmıştır. Harmonik titreşkenin taban durum simülasyonunun gerçekleştirildiği bu bölümde hesaplama, 2 kubitlik NMR kuantum bilgisayar ile gerçekleştirilmiştir. Hesaplama iteratif faz tahmin algoritması kullanılmış olup sistemin taban durumu adyabatik durum hazırlama (ASP) kullanılarak simüle edilmiştir. Deneysel olarak 2 kubitlik kuantum hafıza olarak d-6 asetonda çözülmüş ^{13}C etiketli kloroform molekülü kullanılmıştır. NMR kuantum hesaplama yapılabilmesi için gerekli olan saf durumlar uzaysal toplam metodu ile hazırlanmış olup değişken puls alanları kullanılmıştır. Bu bölümde saf NMR durumları Şekil-3.7’de açıklanan uzaysal ortalama metoduyla hazırlandıktan sonra simülasyonun gerçekleşeceği kubitte ASP süreci denklem (4.4)’te belirtilen üçlü bir puls dizisinin ard arda uygulanması ile elde edilmiştir. Adyabatik gelişim süreci NMR pulslarınca $M = 10$ adıma ayrılmış ve her adımda üçlü puls dizilerinin büyüklükleri değişmiştir. Deneyin numerik simülasyonu ile T süresi Şekil 3.3’teki gibi sınılanmış ve $T = 5,6$ a.u. şeklinde optimum değeri bulunmuştur. Faz tahmin algoritması için gerekli olan kontrollü işlemcilerin NMR puls dizileri şeklinde oluşturulması için ref [129]’daki teknikler kullanılmış ve eşitlik (4.10)’da matris temsili verilmiş kontrollü işlemci eşitlik (4.17)’deki gibi elde edilmiştir. Kuantum hafıza olarak kullanılan 2 kubitlik kloroform molekülünde NMR aktif 2 çekirdekten ^{13}C çekirdeği simülasyonun gerçekleştiği çekirdek, ^1H çekirdeği ise simülasyon bilgisin çıkarıldığı çekirdek olarak düzenlenmiştir. Bu çekirdeğin temsil ettiği kubitte ‘sonda kubit’, simülasyonun gerçekleştiği kubitte ise ‘sistem

kubit' denilmektedir. Simülasyona ait bilgi sonda kubit üzerinden çıkarılmaktadır. Harmonik titreşkenin taban durumu sistem kubit üzerinde hazırlandıktan sonra uygulanan kontrollü işlemcilerin ardından ortaya çıkan enerji bilgisi 'NMR interferometre' denen faz duyarlı NMR spektrumu aracılığı ile elde edilmiştir. Bu durumda harmonik titreşkenin taban durum enerjisi faz duyarlı NMR spektrumları ile iteratif bir şekilde elde edilmiştir. Her bir iterasyonda 2'li sayı sisteminde 3 bitlik bilgi elde edilmiş olup 6 iterasyon sonucu elde edilen 18 bit ondalık değere çevrilerek denklem (3.33)'te yerine yazılıp taban durum enerjisi elde edilmiştir.

Bölüm 4.2'de ise bölüm 4.1'de deneysel olarak uygulanan teknikler numerik olarak kullanılarak etilen $2p - \pi$ elektronları sistemi taban durumu simülasyonu yapılmış, taban durum enerjisi elde edilmiştir. Numerik simülasyon Matlab programı ile yürütülmüş olup ilgili program Ek.1'de verilmiştir. Önceki bölümde izlenen yöntemler takip edilerek numerik simülasyonu yapılan faz duyarlı NMR spektrumundan çıkan bit değerleri Şekil-4.7'de gösterilmiştir. İkili sayı sistemindeki bu bitler ondalık sisteme çevrilip etilen $2p - \pi$ elektronları sistemi taban durumu enerjisi elde edilmiştir.

Bölüm 4.3'te tek boyutlu basamak potansiyeli altında bulunan tek parçacık için kuantum dijital simülasyonu yürütülmüştür. Bunun için tek boyutlu uzay 2 ve 3 kubitlik durumlar için hesaplama bazlarına bölünmüş, kinetik ve potansiyel enerji terimleri oluşturulmuş ve söz konusu tek boyutlu sistem için bir kuantum algoritma oluşturularak uygulanmıştır. Kuantum algoritma ile simule edilen bir parçacığın tek boyutlu engelin belli bölgelerinde bulunma olasılıkları hesaplanarak beklenen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür. Öte yandan yine tek boyutta 3 kubitlik bir uygulama ile Şekil-4.11'deki gibi periyodik potansiyel altında simülasyon gerçekleştirilmiş, yine bulunma olasılıkları ve sistemin farklı ilk durumları altında sistem enerjisinin farklı öz durumlar üzerinden ağırlıklı ortalaması elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar Şekil-4.13'teki gibi verilmiştir. Algoritmanın uygulaması için her bir işlemcinin matris temsili bulunmuş, 2 ve 3 kubitlik QFT oluşturulmuş ve algoritmanın uygulanması ve ölçümler Matlab programı ile gerçekleştirilmiştir. İlgili uygulamaya yönelik program Ek.2'de verilmiştir.

Bölüm 4.4'te bir Jahn-Teller sisteminin ilk defa bir kuantum dijital simülasyon algoritması önerilmiştir. Burada Jahn-Teller sistemi açık bir kuantum sistemi olarak yorumlanmış ve en basit JT sistemi olan $E \otimes b$ sistemi için bir kuantum algoritma geliştirilmiştir. Algoritma, iki seviyeli bir elektronik seviyeyi temsil eden bir kubitte çiftlenmiş bir harmonik titreşici modelini üzerine kurgulanmış ve ilgili hamiltoniyenin yürütücü işlemini uygulamaktadır. Dejenere enerji seviyesini temsil eden kubit açık kuantum sistemini, 2 kubitte temsil edilen harmonik titreşici ise çevre modunu belirtmektedir.

5.2 Öneriler

Yukarıda sonuçları verilen çalışmaların tümü kuantum bilgisayarlarda direkt uygulanabilir algoritmalar içerdiğinden kuantum hesaplama ve kuantum bilgisayarlarının daha iyi anlaşılması ve kavranması bakımından yararlı çalışmalar oluşturmaktadır. Bölüm 4.1'deki deneysel uygulamada deneysel hatalarında hesaba katıldığı bir yaklaşım geliştirilerek hesaplama süreçlerine dahil edilebilir. Aynı süreçler bölüm 4.2'deki teorik hesaplamalar için geçerli olmasa bile deneysel hataları modelleyen bir sistem bölüm 4.2'deki uygulamaya eklenebilir. Öte yandan 2×2 yerine daha büyük Hilbert uzayı gerektiren örneğin 4×4 'lük hamiltoniyenler üzerinde durularak daha çok kubit gerektiren uygulamalar yapılabilir. Bu durumda simülasyon yürütülecek sistem 2 kubitte oluşacağından öncelikle 2 kubit durumu için NMR teknikleriyle ASP yapılmalıdır.

Bölüm 4.3'te geliştirilen ve uygulanan potansiyel engel sistemleri bir fiziksel sistemle bağdaştırılabilir. Örneğin bölüm 4.3.3'te matris temsili oluşturulan 3 kubitlik periyodik potansiyel, Kronig-Penney modeli [7] ile bağdaştırılıp bu modele uygun sonuçlar alınmaya çalışılabilir. Bu şekilde bu kesimdeki çalışma Kronig-Penney modelinin dijital kuantum simülasyonu olarak sunulabilir. Fakat dijital kuantum simülasyondan direkt bilgi elde etmek zor olduğundan bu modele uyumlu sonuçlar almak için farklı ölçüm teknikleri geliştirmek gerekebilir.

Bölüm 4.4'te iki seviyeli bir kuantum sistemle çiftlenmiş harmonik titreşici basit bir JT modeli olarak sunulmuştur. Bu modele göre JT sistemi bir açık kuantum sistemi olarak tanımlanmış, çevre etkisi harmonik titreşken moduyla temsil edilmiştir. Denklem (4.49)'da verilen hamiltoniyeni de son terim çevre modu ile elektronik seviyeyi temsil eden kubit arasındaki etkileşim terimi olup burada λ bu etkileşimin şiddetini belirleyen bir parametredir. Bu sabit, ayarlanabilir bir parametre olarak seçilerek sistemin JT sistemi olma şartının sınırları sınanabilir. Simülasyon sonucunda açık kuantum sistemi temsil eden kubitte ilgili ölçüm yapabilecek uygun işlemciler geliştirilmelidir. Şekil-4.14'te verilen algoritma bu haliyle eşevresizlik etkileri ölçmeye uygun değildir. Açık kuantum sistemlerin tanımına göre çevre, açık kuantum sistem üzerinde bazı etkilerde bulunmakta fakat açık kuantum sistemin çevre sistem üzerindeki etkisi ihmal edilmektedir. Pratik uygulamalarda çevre sistemi temsil edecek kubit sayısı bir kaç geçmeyeceği için çevre sistemin çok büyük serbestlik derecelerini temsil edebilmesi için Şekil-4.14'te önerilen algoritma m parçaya ayrılarak çevreyle etkileşim adımları m kez tekrarlanarak, her tekrarda ise sadece çevre sisteme, sistemi başlangıç durumuna getirecek birimsel olmayan işlemciler uygulanabilir. Bu uygulama, açık kuantum sistemini bir titreşkenler havuzuna daldırmaya eşdeğer olduğu için hem genel bir JT problemi simüle edilmiş olacak, hem de açık kuantum sistem üzerinde dinamik JT etkisinin araştırılması mümkün olabilecektir.

6. KAYNAKLAR

- [1] Nielsen M.A., Chuang I.L. , 2000. Quantum computation and quantum information, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge.
- [2] Hirvensalo M., Quantum Computing, 2010. 2nd ed.,Springer-Verlag, Berlin-Heilderberg.
- [3] Turing A. , 1936. On computable numbers with an application to the entscheidungs problem, Proceedings of the London Mathematical Society, 42, 230–265.
- [4] Shannon C. E. ,1948. A mathematical theory of communication, Bell System Tech. J., 27, 379-423, 623-656.
- [5] Alastair I.M.R., 2002. Quantum Mechanics, Fourth ed., Iop publishing Ltd., U.K. Cornwall.
- [6] Griffiths D.J. , 1995. Introduction to quantum mechanics, 2nd ed., Prentice Hall Inc, New Jersey.
- [7] Atkins P., Friedman R., 2005. Molecular quantum mechanics, 4th ed., Oxford University Press, New York.
- [8] Baggot J., 2004. Beyond the measure, 1st ed., Oxford University Press., New York.
- [9] Vermaas P.E., 1999. Philosopher's understanding of quantum Mechanics, 1st ed., Cambridge University Press., New York.
- [10] Schrödinger E., 1935. The present situation in quantum mechanics, Naturwissenschaften, 23, 807-823.
- [11] Einstein A., Podolsky B. Rosen N. , 1935. Can Quantum mechanical description of physical reality be considered complete?, Physical Review, 47, 777-780.
- [12] Bell J.S., 1964. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox, Physics, 1, 195.
- [13] Aspect A., Dalibard J., Roger G., Experimental test of Bell's Inequalities using time-varying analyzers, Phys. Rev. Lett., 1982. 49, 1804–1807.
- [14] Bennet C.H., 1984. Brassard G., Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing, In Proceedings of IEEE International conference on computers systems and signal processing, 175-179.
- [15] Bennet C.H. , 1992. Wiesner S.J., Communication via one and two-particle operators on Einstein-Podolsky-Rosen states, Phys. Rev. Lett., 69, 2881-2884.
- [16] Bennet C.H., Brassard G.,Wooters W. ve ark. , 1993. Teleporting an unknown quantum state via dual classical EPR channels, Phys. Rev. Lett., 70, 1895-1899.
- [17] Bennet C., 1973. Logical reversibility of computation, IBM Journal research and development, 17, 525-532.
- [18] Benioff P., 1980. The computer as a physical system: A macroscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers represented by turing machines, Journal of Statistical Physics, 22,563-591.

- [19] Feynman R.P. , 1982. Simulating physics with computers, *International Journal of Theoretical Physics*, 21, 467-488.
- [20] Deutsch D. , 1985. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal Quantum Computer, *Proc. R. Soc. Lond.A*, 400, 97-117.
- [21] Shor P.W. , 1994. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In *Proceedings, 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, IEEE press, Los Alamitos, CA.
- [22] Lloyd S. , 1996. Universal Quantum Simulators, *Science*, 273, 1073-1078.
- [23] Grover L. K. , 1997. Quantum mechanics helps in searching a needle in a haystack, *Phys. Rev. Lett.* 97, 325.
- [24] Wotters W.K., Zurek W.H. , 1982. A single quantum cannot be cloned, *Nature*, 299, 802-803.
- [25] Schumacher B. 1995., Quantum coding, *Phys. Rev. A*, 51, 2738-2747.
- [26] Shor P.W. , 1996. Fault-tolerant quantum computation. In *Proceedings, 37th Annual Symposium on Fundamentals of Computer Science*, IEEE Press, Los Alamitos CA, 56-65.
- [27] Steane A.M. ,1996. Multiple particle interference and quantum error correction, *Proc. R. Soc. London A*, 452, 2551-2576.
- [28] Imamoglu A., Yamamoto Y., 1994. Turnstile device for heralded single photons: Coulomb blockade of electron and hole tunneling in quantum confined pi-n heterojunctions, *Phys Rev. Lett.*, 72, 210-213.
- [29] Cirac J.I., Zoller P. 1995. Quantum computation with cold trapped ions, *Phys Rev.Lett.*, 74, 4091.
- [30] Di Vincenzo D.P. ,1995. Two-bit gates are universal for quantum computation, *Phys. Rev.A*, 51, 1015-1022.
- [31] Cory D.G., Fahmy A.F., Havel T.F., 1997. Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, 94, 1634-1639.
- [32] Kane B., 1998. A silicon based nuclear spin quantum computer, *Nature*, 393,133-137.
- [33] Imamoglu A., DiVincenzo D.P., Burkard G. et al., 1999. Quantum information processing using dot spins and cavity qed, *Phys. Rev. Lett.*, 83, 4204-4207.
- [34] DiVincenzo D.P., 2000. The physical implementation of quantum computation, *Fortschr.Phys.*, 48, 771-783.
- [35] Jones J.A., 2011. Quantum computing with NMR, *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, 59, 91-120.
- [36] Jones J.A., Mosca M., 1998. Implementation of a quantum algorithm on a nuclear magnetic resonance quantum computer, *J. Chem. Phys.*, 109, 1648.
- [37] Chuang I.L.,Gershenfeld N.,Kubinec M., 1998. Experimental implementation of fast quantum searching, *Phys.Rev. Lett*, 80, 3408.
- [38] Vandersypen L.M.K., Steffen M., Breyta G., Chuang I. L. ve ark., 2000. Experimental realization of an order-finding algorithm with an NMR quantum computer, *Phys. Rev. Lett.*, 85, 5452.
- [39] Vandersypen L.M.K., Steffan M, Chuang I.L. ve ark., 2001. Experimental realization of Shor's quantum factor in algorithm using nuclear magnetic resonance, *Nature*, 414, 883.

- [40] Kassal I., Whitfield J.D., Guzik A. ve ark., 2011. Simulating chemistry using quantum computers, *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 62, 185-207.
- [41] Abrams S., Lloyd S., 1997. Simulation of Many Body fermi Systems on a Universal Quantum Computer, *Phys. Rev. Lett.*, 79, 2586-2589.
- [42] Zalka C., 1998. Simulating quantum systems on a quantum computer, *Proc. R. Soc. Lond. A*, 454, 313-322 .
- [43] Somaroo S., Tseng C.H., Laflamme R. ve ark., 1999. Quantum simulations on a quantum computer, *Phys. Rev. Lett.*, 82, 5381-5384.
- [44] Tseng C. H., Somaroo S, Laflamme R. ve ark. 1999. Quantum simulation of a three body-interaction hamiltonian on an NMR Quantum Computer, *Phys. Rev.A*, 61, 012302.
- [45] Krithin A. K., Fung B.M. , 2001. NMR simulation of an eight state quantum system, *Phys. Rev. A* 64, 032306.
- [46] Negrevergne C, Somma R , Ortiz G. ve ark., 2005. Liquid state NMR simulations of quantum many body problems, *Phys. Rev.A* , 71, 032344.
- [47] Peng X., Du J., Suter D., 2005 Quantum phase transition of ground state entanglement in a heisenberg spin chain simulated in an nmr quantum computer, *Phys. Rev. A.*, 71, 012307.
- [48] Brown K. R., Clark R.J, Chuang I. L., Limitations of quantum simulation examined by simulating a pairing hamiltonian using nuclear magnetic resonance, *Phys. Rev. Lett.* 97, 2006. 050504.
- [49] J. Du , N. Xu , X. Peng , P. Wang , S. Wu and D. Lu , 2010. Nmr implementation of a molecular hydrogen simulation with adiabatic state preparation , *Phys. Rev. Lett.*, 104 , 030520.
- [50] Li Z. , Yung M. H., Chen H., Lu. D. , Whitfield J.D., Peng X. , Guzik A.A. , and J. Du, 2011. Solving ground state problems with nuclear magnetic resonance, *Scientific Reports*, 1, 88 , 1-7.
- [51] Guzik A.A., Dutoi A.D., Love P.J., Gordon M.H., 2005. Simulated quantum computation of molecular energies, *Science*, 309, 1704.
- [52] Kassal I, Jordan P., Peter, Mohseni M., Guzik A. , 2008. Polynomial-time quantum algorithm for the simulation of chemical dynamics , *PNAS*, 105 , 18861-18686.
- [53] Ward N.J., Kassal I., Guzik A.A., Preparation of many-body states for quantum simulation, *The Journal of Chemical Physics*, 2009. 130, 194105.
- [54] Kassal I., Guzik A.A., 2009. Quantum algorithm for molecular properties and geometry optimization, *The Journal of Chemical Physics*, 131, 224102.
- [55] Lanyon B.P. , Whitfield J.D., Guzik A.A. ve ark., 2010. Towards quantum chemistry on a quantum computer , *Nature Chemistry* , 2, 106-111.
- [56] Veis L., Pittner J., 2010. Quantum Computing applied to calculations of molecular energies:CH₂ benchmark, *The Journal of Chemical Physics*, 133, 194106
- [57] Whitfield J.D., Biamonte J., Guzik A.A., 2011. Simulation of electronic structure hamiltonians using quantum computers, *Molecular Physics*, 109, 735-750.
- [58] Messiah A., 1976. *Quantum Mechanics Vol.2*, Wiley, 1st ed., New York.
- [59] Steffen M., Hogg T., Chuang I. ve ark., 2003. Experimental implementation of an adiabatic quantum optimization algorithm, *Phys. Rev. Lett.*, 90, 067903.

- [60] Biamonte J.D., Whitfield J.D., Guzik A.A., 2011. Adiabatic quantum simulators, AIP Advances, 1, 022126.
- [61] Reichl L. E., 1980. A Modern Course in Statistical Physics, 1st ed., Texas University Press, Texas.
- [62] Landauer R., 1961. Irreversibility and heat generation in the computing process, IBM J. Res. Develop, 5, 183.
- [63] Oliveira I.S., Bonagamba T.J., Sarthour R.S., Freitas J.C.C., Azevedo E.V., 2007. Nmr quantum information processing, 1st ed., Elsevier, Netherlands.
- [64] Aora S., Barak B. , 2009. Computational Complexity : A Modern Approach, 1st ed., Cambridge University Press., UK.
- [65] Bransden B. H., Joachain C.J., 2000. Quantum mechanics, 2nd ed., Pearson Education, Londra.
- [66] Sakurai J.J., 1994. Modern quantum mechanics revised edition, 2nd ed., Addison-Wesley Publishing, California.
- [67] Tonomura A., Endo J., Kawasaki T. ve ark., 1989. Demonstration of single electron build-up of an interference pattern, Am. J. Phys., 57, 117-120.
- [68] Haroche S., Raimond J.B., 2006. Exploring the Quantum: atoms, cavities and photons, 1st ed., Oxford University Press Inc., New York,
- [69] Friedman J.R., Patel Vijay, Chen W. ve ark., Quantum superposition of distinct macroscopic states, Nature, 2000, 406, 43-46.
- [70] Schlosshauer M., 2007. Decohorence and the quantum to classical transition, 1st ed., Springer- Verlag, New York.
- [71] Breuer H.P., Petruccione F., 2002. Theory of open quantum systems, 1st ed., Oxford University Press., New York.
- [72] Barenco A., Bennet C.H., Di Vincenzo D.P. ve ark., 1995. Elemenatry gates for quantum computation, Phys Rev.A., 52, 3457-3467.
- [73] Di Vincenzo D.P., 1995. Two-bit gates are universal for quantum computation, Phys. Rev.A, 51, 1015-1022.
- [74] Möttönen M., Vartiainen J.J., Bergholm V., 2004. Quantum circuits for general multiqubit gates, Phys. Rev. Lett., 93, 130502.
- [75] Lanzagorta M. , Uhlmann J., 2009. Quantum Computer Science, 1st ed., MC Publishers, Missouri-Columbia,
- [76] Abrams D., Llyod S., 1999. Quantum algorithm providing exponential speed increase for finding eigenvalues and eigenvectors, Phys. Rev. Lett., 83, 5162-5165.
- [77] Nakahara M., Ohmi T., 2008. Quantum Computing from linear algebra to physical realizations, 1st ed., Taylor & Francis, Osaka.
- [78] Awschalom D., Carlton Caves C. Chapman M. ve ark., A quantum information science and technology roadmap, Advanced Research and Development Activity (ARDA), <http://qist.lanl.gov/> (Ziyaret tarihi: 21 Aralık 2012)
- [79] Viola L., Knill E., Lloyd S., 1999. Dynamical decoupling of open quantum systems, Phys. Rev. Lett., 82, 2417-2421.
- [80] Viola L., Knill E., 2003. Robust dynamical decoupling of quantum systems with bounded controls, Phys. Rev. Lett., 90, 037901.
- [81] Uhring G.Z., 2007. Keeping a quantum bit alive by optimized π -pulse Sequences, Phys. Rev. Lett., 98, 100504.

- [82] Ng H.K., Lidar D.A., Preskill J., 2011. Combining dynamical decoupling with fault-tolerant quantum computation, *Phys. Rev. A*, 84, 012305.
- [83] Kitaev A.Y., 2003. Fault-tolerant quantum computation by anyons, *Annals of Physics*, 303, 2-30.
- [84] Brown K. L., Munro W.J., Vivien M., Kendon V.M., 2010. Using quantum computers for quantum simulation, *Entropy*, 12, 2268-2307.
- [85] Zalka C., 1998. Simulating Quantum Systems on a Quantum Computer, *Proc. R. Soc. Lond.A*, 454, 313-322
- [86] Trotter H.F., 1959. On the product of semi-groups of operators, *Proc. Amer. Math. Soc.*, 10, 545-551
- [87] Suzuki M., 1993. *Quantum Monte Carlo methods in condensed matter physics*, 1st ed., World Scientific, Singapur.
- [88] Coppersmith D., 1994. An approximate Fourier transform useful in quantum factoring, IBM Research Report, RC 19642.
- [89] Benetti G., Strini G., 2008. Quantum simulation of the single-particle Schrödinger equation, *Am. J. Phys.* 76, 657-662.
- [90] Alvarez G., 2007. Decoherence of many-spin systems in NMR : from molecular characterization to an environmentally induced quantum dynamical phase transition. *Doktora Tezi*, Cordoba Üniversitesi, Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Cordoba.
- [91] Bloch F., 1946. Nuclear induction, *Phys Rev.*, 70, 460-485.
- [92] Purcell E.M., Pound R.V., Bloembergen N., 1946. Nuclear magnetic resonance absorption in hydrogen gas. *Phys. Rev.*, 70, 986.
- [93] Purcell E.M., Torrey H.C., Pound R.V., 1946. Resonance absorption by nuclear magnetic moments in a solid, *Phys. Rev.*, 69, 37.
- [94] Torrey H.C., 1949. Transient nutations in nuclear magnetic resonance, *Phys. Rev.*, 76, 1059.
- [95] Hahn E.L., 1950. Nuclear induction due to free larmor precession, *Phys. Rev.*, 77, 297.
- [96] Levitt M. H., 2008. *Spin Dynamics*, 2nd ed., John Wiley&Sons, Chichester.
- [97] Abragam A., 1961. *Principles of Nuclear magnetism*, Clarendon Press, Oxford UK.
- [98] Ernst R. R., Bodenhausen G., Wokaun A., 1987. *Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions*, 1st ed., Oxford University Press, Oxford.
- [99] Goldman M., 1988. *Quantum description of high resolution NMR in liquids*, Clarendon Press, Oxford UK.
- [100] Freeman R., 1987. *A handbook of nuclear magnetic resonance*, Longman, Harlow UK.
- [101] Hore P.J., Jones J.A., Wimperis S., 2000. *Nmr: the toolkit*, Oxford Chemistry Primers, Oxford UK.
- [102] Stolze J., Suter D., 2008. *Quantum Computing: A short course from theory to experiment*, 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim.
- [103] Vandersypen L.M.K., Chuang I.L., 2004. Nmr techniques for quantum control and computation, *Rev.Mod. Phys.*, 76, 1037-1069.
- [104] Kessler H., Mronza S., Gemmecker G., 1991. Multi-dimensional NMR experiments using selective pulses, *Magnetic Resonance in Chemistry*, 29, 527-557.

- [105] Freeman R., 1998. Shaped Radiofrequency Pulses in high resolution NMR, *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spect.*, 32, 59-106.
- [106] Haeberlen U., Waugh J.S., 1968. Coherent Averaging effects in magnetic resonance, *Phys. Rev. Lett.*, 175, 453-467.
- [107] Mansfield P., Morris P.G., 1982. *Nmr imaging in biomedicine*, Adv. Mag. Res., Academic Press., New York.
- [108] Hahn E.L., 1950. Spin echoes, *Phys. Rev.* 80, 580-594.
- [109] Cory D. G., Price M.D., 1998. Havel T.F., Nuclear magnetic resonance spectroscopy: an accessible paradigm for quantum computing, *Physica D*, 120, 82-101.
- [110] Farhi E., Goldstone J., Gutmann S., 2001. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an Np-complete problem, *Science*, 292, 472-476.
- [111] Lloyd S., Kempe J., Aharonov D. ve ark., 2004. Proceedings of the 45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science, 0272-5428.
- [112] Chuang I., Steffen M., dan V.W ve ark., 2003 Experimental implementation of an adiabatic optimization Algorithm, *Phys. Rev. Lett.*, 90, 067903
- [113] Cory D.G., Laflamme R., Lloyd S., ve ark., 2000. Nmr based quantum information processing: Achievements and prospects., *Fortschr. Phys.*, 48, 875-907.
- [114] Chuang I.L., Knill E., Laflamme R. ve ark., 1998. Effective pure states for bulk quantum computation, *Phys. RevA*, 57, 3348-3363.
- [115] Chuang I.L., Gershenfeld M.G., Kubinec M.G. ve ark., 1998. Bulk quantum computation with nuclear magnetic resonance: theory and experiment., *Proc. R. Soc.*, 454, 447-467.
- [116] Laflamme R., Knill E., Cory D. ve ark., 2002. Nmr and quantum information processing, *Los Alamos Science*, 27, 227-259.
- [117] Jones J.A, Mosca M., Hansen R.H., 1998. Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer, *Nature*, 393, 344-346.
- [118] Jones J.A., Mosca M., 1999. Approximate quantum counting on an nmr ensemble quantum computer, *Phys Rev. Lett.*, 83, 1050-1054.
- [119] Cory D.G, Laflamme R., Havel T.F., 1998. Experimental error correction, *Phys. Rev. Lett.* , 81, 2152-2155.
- [120] Nielsen M. A., Knill E., Laflamme R., 1998. Complete quantum teleportation using nuclear magnetic resonance., *Nature*, 396, 52-55.
- [121] Price M.D., Somaroo S.S., Havel T.F., 1999. Generalized methods for the development of quantum logic gates for an NMR quantum information processor, *Phys. Rev.A*, 60, 2777-2780.
- [122] Vanderspen L.M.K., Steffen M., Chuang. I.L., 2000. Experimental realization of an order-finding algorithm with an nmr quantum computer, *Phys Rev. Lett.*, 85, 5452-5455.
- [123] Gershenfeld N.A., Chuang I.L., 1997. Bulk Spin-Resonance Quantum Computation, *Science*, 275, 350-356.
- [124] Cory D.G. et. al., 1999. Observations of quantum dynamics by solution state NMR spectroscopy, *Concepts in Magnetic Resonance*, 11, 225-238.
- [125] Jahn H.A., Teller E., 1937. Stability of polyatomic molecules in degenerate electronic states, *Proc. Roy. Soc. Lond. Ser.A*, 161, 220-235.

- [126] Bersuker I.B., 2006. The Jahn-Teller effect, 1st ed., Cambridge University Press, Cambridge.
- [127] Cotton F.A., 1990. Chemical applications of group theory, 3rd. ed., Wiley&Sons Inc., Massachusets.
- [128] Terhal B. M., Di Vincenzo D.P., 2000. Problem of equilibration and the computation of correlation functions on a quantum computer, Phys Rev.A, 61, 022301.
- [129] Wang H., Ashhab S., Nori F., 2011. Quantum algortihm for simulating the Dynamics of an open quantum system, Phys Rev.A, 83, 062317.
- [130] O'Brien M.C.M., 1972. The dynamic Jahn-Teller effect with many frequencies: a simple approach to a complicated problem, J.Phys. C: Solid State Phys, 5, 2045-2063.
- [131] Larson J., 2008. Jahn Teller systems from a cavity QED perspective, Phys Rev.A, 78, 033833.

7. EKLER

7.1. Ek1: Etilen Molekülü Simülasyonu Matlab Programı

```
clc
clear all
Ix=[0 1;1 0];
Iy=[0 -i;i 0];
Iz=[1 0;0 -1];
Id=eye(2);
Hm=pi/2*215*kron(Iz,Iz);
Mxy=kron((Ix+i*Iy),eye(2));
Dn=[1 0 0 0;0 0 0 0;0 0 0 0;0 0 0 0];
%ASP
M=11;
T=5.52;
d = T/(M + 1);
t=@(m)atan(abs(-(m/M)/(1 - m/M)));
S0=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(0)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(0)/2);
S1=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(1)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(1)/2);
S2=expm(i*kron(Id,Iy)*t(2)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(2)/2);
S3=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(3)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(3)/2);
S4=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(4)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(4)/2);
S5=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(5)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(5)/2);
S6=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(6)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(6)/2);
S7=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(7)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(7)/2);
S8=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(8)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(8)/2);
S9=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(9)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(9)/2);
S10=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(10)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(10)/2);
S11=expm(-i*kron(Id,Iy)*t(11)/2)*expm(-
i*kron(Id,Ix)*d/2)*expm(i*kron(Id,Iy)*t(11)/2);
O11=S11*S10*S9*S8*S7*S6*S5*S4*S3*S2*S1*S0;
%EXPERİMENT
U1=expm(i*kron(Id,Iy)*pi/4);
Uhad=expm(-i*kron(Iy,Id)*pi/4);
CU0=expm(-i*kron(Iz,Iz)*pi/12)*expm(i*kron(Id,Iz)*pi/12);
CU8=expm(-i*kron(Iz,Iz)*2*pi/3)*expm(i*kron(Id,Iz)*2*pi/3);
CU82=expm(-i*kron(Iz,Iz)*pi/3)*expm(i*kron(Id,Iz)*pi/3);
Op1=expm(i*kron(Iz,Id)*pi/12)*CU0;
Op2=expm(i*kron(Iz,Id)*pi/24)*CU8;
Op3=expm(i*kron(Iz,Id)*pi/12)*CU82;
```

```

Dn2=Uhad*O11*U1*Dn*U1'*O11'*Uhad';
Dn3=Op3*Dn2*Op3';

p=0:0.001:1;
for k=1:length(p)
    Uz=expm(-i*Hm*p(k));
    Dn4=Uz*Dn3*Uz';

    F(k)=trace(Mxy*Dn4)*exp(-p(k)/0.2);
end
figure(1)
%subplot(121)
plot(p,real(F),'-')
ff=fftshift(fft(F));
fr=1000*(0:length(p)-1)/length(p) - 1000/2;
figure(2)
plot(fr,real(ff))

```

7.2. Ek2: Tek Boyutlu Model Kuantum Sistem Matlab Programı

```

clc
p0=[1;0];
p1=[0;1];
Id=eye(2);
Id2=eye(4);
Id3=eye(8);
hd=[1 1;1 -1]/sqrt(2);
%Fourier transform
CR2=[1 0 0 0;0 1 0 0;0 0 1 0;0 0 0 exp(2*pi*i/2^2)];
CR3=[1 0 0 0 0 0 0;0 1 0 0 0 0 0;0 0 1 0 0 0 0;0 0 0 1 0 0 0;0 0 0 0 1 0 0;0 0 0 0 0 1 0;0 0 0 0 0 0 exp(2*pi*i/2^3)];
Swp2=[1 0 0 0;0 0 1 0;0 1 0 0 ;0 0 0 1];
Swp3=[1 0 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 0 0 0 0
1 0 ;0 1 0 0 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 0 0 0
1];
F1=kron(hd,Id);
F3=kron(Id,hd);
Qft2=Swp2*F3*CR2*F1;
Qft3=Swp3*kron(Id,F3)*kron(Id,CR2)*kron(F3,Id)*CR3*kron(CR2,Id)*kron
(F1,Id);
%Potential Term

t=0.0625*8;
V2=[1 0 0 0;0 exp(i*2*pi*t/100) 0 0;0 0 1 0;0 0 0 1];
V3=[1 0 0 0 0 0 0;0 exp(i*2*pi*t/100) 0 0 0 0 0;0 0 1 0 0 0 0
0;0 0 0 exp(i*2*pi*t/100) 0 0 0 0;0 0 0 0 1 0 0 0;0 0 0 0 0
exp(i*2*pi*t/100) 0 0;0 0 0 0 0 0 1 0;0 0 0 0 0 0 0 0
exp(i*2*pi*t/100)];
%Kinetic Term
%Kinetic2Qubit

a2=-0.32*pi^2;
fz2=[exp(i*a2/4) 0;0 exp(i*a2/4)];
T211=[1 0;0 exp(-i*a2/2)];
T212=[1 0;0 exp(-i*a2/4)];
T221=[1 0;0 exp(i*a2/4)];
T222=[1 0;0 exp(i*a2/16)];

```

```
C2T=[1 0 0 0;0 1 0 0;0 0 1 0;0 0 0 exp(i*2*a2/8)];
T2=kron(T221,T222)*kron(T211,T212)*kron(fz2,Id)*C2T;
```

```
%Kinetic3Qubit
```

```
a3=-1.28*pi^2;
fz3=[exp(i*a3/4) 0;0 exp(i*a3/4)];
T311=[1 0;0 exp(-i*a3/2)];
T312=[1 0;0 exp(-i*a3/4)];
T313=[1 0;0 exp(-i*a3/16)];
T321=[1 0;0 exp(i*a3/4)];
T322=[1 0;0 exp(i*a3/16)];
T323=[1 0;0 exp(i*a3/256)];
C3T12=[1 0 0 0;0 1 0 0;0 0 1 0;0 0 0 exp(i*2*a3/8)];
C3T13=[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 0 0 exp(2*a3*i/2^4) 0 0;0 0 0 0 0 0 1 0;0 0
0 0 0 0 exp(2*a3*i/2^4)];
C3T23=[1 0 0 0;0 1 0 0;0 0 1 0;0 0 0 exp(2*a3*i/2^5)];
T3=kron(Id,C3T23)*C3T13*kron(C3T12,Id)*kron(kron(T321,T322),T323)*kr
on(kron(T311,T312),T313)*kron(kron(fz3,Id),Id);
```

```
%2Qubit Algoritma-olasılıklar
```

```
U2=Qft2*T2*Qft2'*V2;
```

```
%U2=Qft2*T2*Qft2';
```

```
ps00=kron(p0,p0);
ps01=kron(p0,p1);
ps10=kron(p1,p0);
ps11=kron(p1,p1);
psi00=kron(hd,hd)*kron(p0,p0);
psit=U2^100*psi00;
Rst00=ps00'*psit;
Rst01=ps01'*psit;
Rst10=ps10'*psit;
Rst11=ps11'*psit;
Pro00=(abs(Rst00))^2;
Pro01=(abs(Rst01))^2;
Pro10=(abs(Rst10))^2;
Pro11=(abs(Rst11))^2;
X=[Pro00 Pro01 Pro10 Pro11];
Y=Pro00+Pro01+Pro10+Pro11;
```

```
%Hamiltoniyen beklenen değeri
```

```
dna=[1;1]/sqrt(2);
Mxy=2*p0*p1';
int3=kron(dna,psi00);
CV=kron(p0*p0',Id2)+kron(p1*p1',U2^100);
fin3=CV*int3;
E=trace(kron(Mxy,Id2)*fin3*fin3');
abs(E)
```

```
%3Qubit Algoritma
```

```
ps000=kron(ps00,p0);
ps001=kron(ps00,p1);
ps010=kron(ps01,p0);
ps011=kron(ps01,p1);
ps111=kron(ps11,p1);
```

```
psi000=kron(kron(hd,hd),hd)*ps000;  
U3=Qft3*T3*Qft3'*V3;  
int4=kron(dna,ps111);  
CV3=kron(p0*p0',Id3)+kron(p1*p1',U3^100);  
fin4=CV3*int4;  
E3=trace(kron(Mxy,Id3)*fin4*fin4');  
abs(E3)
```

8. ÖZGEÇMİŞ

Ad Soyad: Deniz Türkpençe

Lisans Eğitimi: Ondokuz Mayıs Üniversitesi Eğitim Fakültesi Fizik Bölümü (1995-2000)

Yüksek Lisans Eğitimi: Ondokuz Mayıs Üniversitesi (2005-2007)

İrtibat: dturkpençe@omu.edu.tr

1977 yılında Samsun Saitbey Mahallesi'nde doğdum. İlk, orta ve lise öğrenimimi Samsun'da tamamladıktan sonra 1995 yılında Ondokuz Mayıs Üniversitesi Eğitim Fakültesi Fizik Bölümüne başladım. 2000-2004 yılları arasında çeşitli özel kurumlarda çalıştıktan sonra askerlik görevimi (2004-2005) Şırnak/Silopi'de tamamladım. 2005 güz döneminde Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde yüksek lisans eğitimine başladım. Aralık 2006'da OMÜ Fen Bilimleri Enstitüsünde Araştırma görevlisi olarak çalışmaya başladım. Şubat 2007'de Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde doktora eğitimine hak kazandım. Mart 2010'da YÖK bursu ile doktora eğitimimin 1 yıllık kısmını Almanya, Dortmund Teknik Üniversitesi'nde tamamladım. Halen OMÜ Fen Bil. Enst.'de araştırma görevlisi olarak çalışmaktayım.