



MARMARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



**ÇOK BOYUTLU KUANTUM
SİSTEMLERDE KUANTUM MONTE
CARLO ALGORİTMALARI
KULLANARAK DOLAŞIKLIĞIN
ÖLÇÜLMESİ**

İZZET PARUĞ DURU

DOKTORA TEZİ
Fizik Anabilim Dalı
Katıhal Fiziği Programı

DANIŞMAN
Prof.Dr. Şahin AKTAŞ

İSTANBUL, 2017



MARMARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



**ÇOK BOYUTLU KUANTUM
SİSTEMLERDE KUANTUM MONTE
CARLO ALGORİTMALARI
KULLANARAK DOLAŞIKLIĞIN
ÖLÇÜLMESİ**

İZZET PARUĞ DURU
(720311003)

DOKTORA TEZİ
Fizik Anabilim Dalı
Katıhal Fiziği Programı

DANIŞMAN
Prof.Dr. Şahin AKTAŞ

İSTANBUL, 2017

ÖNSÖZ

Bu tez çalışmasında kuantum lokalize dolaşıklık ve dolaşıklığın sınırları, dipol-dipol etkileşmesi dahil edilmiş Heisenberg Hamiltoniyeni ile temsil edilmiş spin-1/2 ferromanyetik, antiferromanyetik ve karışık sistemlerde incelenmiştir. Uzun erimli etkileşmelerin katkısının niteliği ortaya çıkartılmak istenmiştir.

Bu tez çalışmasına 2211-C Öncelikli Alanlar Bursu ile maddi katkılarından dolayı TÜBİTAK-Bilim İnsanı Destek Programları Başkanlığı (BİDEB)'e teşekkür ederim.

Öncelikle tez konusunun belirlenme aşamasında bana olan güvenini koruyarak tercihlerimde hep yanımda olan değerli danışman hocam sayın Prof. Dr. Şahin AKTAŞ'a teşekkürlerimi sunarım.

Teorik ve nümerik çalışmaların tamamlandığı Simülasyon & Modelleme Araştırma Laboratuvarının kurulmasında öncü olan Prof. Dr. Şahin AKTAŞ, Uğur YAHŞİ ve Muhammet ARUCU'ya; beraberinde FEN-C-DRP-120613-0273 no'lu doktora projesi ile destekleyen Marmara Üniversitesi Proje Araştırmaları Koordinasyon Birimi'ne teşekkürlerimi sunarım.

Bu zorlu süreçte yanımda olan değerli arkadaşlarım Saba KARAKAŞ, Caner DEĞER, Neşe GÜNGÖR, Vahap ELDEM, Taner KALAYCI ve İlhan YAVUZ'a teşekkür ederim.

Eğitim ve öğretim hayatım boyunca benden maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen Süheyla DURU, Arif Şeney DURU, Dilek Göksel Duru ve Adil Deniz DURU'ya ve burada adı yazılmamış tüm geniş aile bireylerine teşekkür ederim.

Tez çalışması süresince nefesini kalemimde hissettiğim, attığım her adımda yanımda olduğunu bildiğim, sevgili eşim Esra İŞBİLEN DURU'ya tüm kalbimle teşekkür ederim.

Ekim, 2017

İzzet Paruğ DURU

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	i
İÇİNDEKİLER.....	ii
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
SEMBOLLER	vi
KISALTMALAR	viii
ŞEKİL LİSTESİ	ix
TABLO LİSTESİ	xviii
1. GİRİŞ ve AMAÇ.....	1
1.1. Kuantum Mekaniğinin Temel Ön Kabulleri.....	1
1.2. Fiziksel Gerçeklik ve EPR Paradoksu.....	3
1.3. Gizli Değişkenler, Bell Teoremi ve Kuantum Dolaşıklığı	7
1.4. Dolaşıklık Durumlar Nasıl Hazırlanır?	15
1.4.1. Aşağı Dönüşüm.....	15
1.4.2. Kuantum-Elektrodinamik Kavite.....	16
1.4.3. Ayırt Edilemez Parçacıklar	16
1.5. Dolaşıklığın Ölçülmesi: Lokalize Dolaşıklık	16
1.6. Amaç	18
2. MATERYAL VE YÖNTEM	21
2.1. Spin-1/2 Zinciri ve Kuantum Monte Carlo Formalizmi.....	21
2.1.1. Trotter Formülü ve D+1 Boyutlu Klasik Sistem.....	21
2.1.2. Zassenhaus Yaklaşımı.....	28
2.1.3. Monte Carlo Yol İntegrali.....	28

2.1.4. Önem Örneklemesi ve Metropolis Algoritması	31
2.2. Spin Yönelimi Değiştirme Yöntemleri	32
2.3. Negatif İşaret Problemi	34
2.4. Loop Algoritması	36
2.5. Ortalama Değerler ve Termodinamik Nicelikler	44
2.6. Lokalize Dolaşıklığın Sınırları	45
3. BULGULAR VE TARTIŞMA	49
3.1. Heisenberg Hamiltoniyeni ve Dipol-Dipol Etkileşmesi	49
3.2. Ferromanyetik ve Antiferromanyetik XXX Modeli	57
3.2.1. Ferromanyetik XXX Modeli	58
3.2.2. Anti Ferromanyetik XXX Modeli	72
3.3. Karışık Durumlar	83
3.3.1. Birinci Tip Karışık Durumlar	84
3.3.2. İkinci Tip Karışık Durumlar	96
4. SONUÇLAR	109
KAYNAKÇA	112
ÖZGEÇMİŞ	124

ÖZET

ÇOK BOYUTLU KUANTUM SİSTEMLERDE KUANTUM MONTE CARLO ALGORİTMALARI KULLANARAK DOLAŞIKLIĞIN ÖLÇÜLMESİ

Kuantum dolaşıklık, kuantum bilgi teknolojileri ve kuantum bilgisayarların gelişimi açısından önemli bir yer teşkil etmektedir. Dolaşık sistemlerin, özellikle maksimum dolaşık sistemlerin oluşturulması, çok uzak uzaysal mesafelerde bulunan sistemler arasında ilişkinin varlığını koruduğu yaklaşımıyla kuantum iletişim için çarpıcı bir noktada durmaktadır. Bu tez çalışmasında tek boyutlu kuantum spin-1/2 zincirinde dipol-dipol etkileşmesinin varlığında Heisenberg modeli için lokalize dolaşıklık hesaplanmıştır; ki lokalize dolaşıklık, sistemde maksimum kuantum dolaşıklığın ölçüsünü belirler. Tek boyutlu kuantum spin-1/2 zinciri Suzuki-Trotter dekompozisyon metodu ile 2 boyutlu klasik kare spin-1/2 örgüsüne dönüştürülür. Markov Zinciri Monte Carlo (MZMC) simülasyon metodu ile Metropolis ve Loop Algoritmaları kullanılarak bölüşüm fonksiyonu, iki-spin korelasyonları ve S^{α} ortalama değerler hesaplanmıştır. Buna ek olarak lokalize dolaşıklığın ölçüsü, dolaşıklığın alt ve üst sınırları belirlenerek incelenmiştir. Dipol-dipol etkileşiminin dolaşıklığa etkisi, izotropik ferromanyetik, anti-ferromanyetik XXX ve karışık XXZ sistemler için incelenmiştir. Tüm modellerde dipole-dipol etkileşim sabiti D 'ye ve harici alan B_z 'ye bağlı olarak alt sınır ve üst sınırın davranışı değişmektedir. Dipol-dipol etkileşmesinin varlığı ile, dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerlerin uzaklığa bağlı değişiminde, D 'nin değişiminin etkili olduğu sonucu elde edilmiştir. Lokalize dolaşıklığa dipol-dipol etkileşmesinin varlığı (D), harici alan B_z altında ve değiş-tokuş etkileşmesinin dahil edildiği spin-1/2 kuantum zincirini temsil eden Heisenberg Hamiltoniyi'nin T sıcaklığına ve n komşu spin sayısına bağlı olarak dolaşıklığın alt ve üst sınırlarını etkilediği anlaşılmıştır. Dolaşıklığın alt sınırında tek-çift benzeri etki ve uyanış fenomeni gözlenmiştir.

Anahtar kelimeler: Monte Carlo simülasyonu, Dipol-dipol etkileşmesi, Lokalize dolaşıklık, Heisenberg hamilltoniyeni

Kasım, 2017

İzzet Paruğ DURU

ABSTRACT

MEASUREMENT OF LOCALIZABLE ENTANGLEMENT IN MANY BODY QUANTUM SYSTEMS BY MONTE CARLO ALGORITHMS

Formation of entanglement especially generating maximum amount of entangled pairs (systems) which have been separated over a wide distance, occupy an important place for quantum communication by the assumption of preserving initial presence of correlation between them. In this study, localizable entanglement is calculated for dipole-dipole interaction added Heisenberg model spin-1/2 quantum chain. Localizable entanglement is defined as the maximum amount of entanglement in the system. Quantum spin-1/2 chain is mapped to classical square lattice as a checkerboard representation by Suzuki-Trotter decomposition method. Quantum Monte Carlo, based on Markov Chain Monte Carlo, Worldline Monte Carlo and Loop Algorithm, is used to evaluate partition function, expected values of S^α , α denotes x,y and z, and two-spin correlation to calculate the bounds of entanglement. Effect of dipole-dipole interaction to the bounds of entanglement is investigated in both isotropic ferromagnetic, anti-ferromagnetic and mixed Heisenberg systems. Behavior of lower and upper bounds depends on the increasing or decreasing value of D and uniform external field B_z for investigated models. However, existence of dipolar interaction plays a crucial role on lower bound as having an entanglement length that does not vanish by the increasing distance for certain temperatures although disordering effect of high temperature could not be prevented. In conclusion dipolar interaction can be used as a resource for quantum information, teleportation and quantum computation by tuning D. It is found that dipolar interaction effects the bounds of entanglement according to the increasing distance (n). Revival phenomena and odd-even like effect is observed in the sense of lower bound of entanglement.

Keywords: Monte Carlo method, Dipole-dipole interaction, Localizable entanglement, Heisenberg hamiltonian

November, 2017

İzzet Paruğ DURU

YENİLİK BEYANI

Bu çalışmada, dipol-dipol hamiltoniyeni eklenmiş Heisenberg spin-1/2 sisteminde lokalize dolaşıklık, dolaşıklığın sınırları üzerinden belirlenmiştir. Hem analitik hem de numerik çözümler elde edilen sonuçlar ve sonuçların yorumlanması olmak üzere bilimsel özgünlüğe sahiptir.



SEMBOLLER

ρ : Yoğunluk Matrisi

m : Trotter Sayısı

Z : Bölüşüm Fonksiyonu



KISALTMALAR

KMC	: Kuantum Monte Carlo
MCMC	: Markov Zinciri Monte Carlo (Markov Chain Monte Carlo)
LOCC	: Lokal İşlemler ve Klasik İletişim (Local Operations and Classical Communications)
MZMC	: Markov Zinciri Monte Carlo
ST	: Suzuki-Trotter Dekompozisyonu
EPR	: Einstein-Podolski-Rosen
CH74	: Clauser-Horne, 1974
CSCH	: Clauser-Horne-Shimony-Holt
GHZ	: Greenberger-Horne-Zeilinger

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 1.1. a,b ve c kuantizasyon eksenleri ve bu yönler arasındaki açılar.....	6
Şekil 2.1. $N=6$ spin-1/2 ve Trotter sayısı (M) 5 olan kare spin örgüsü hale gelmiş spin zincirinin bölüşüm fonskiyonunun satranç tahtası dekompozisyonunu temsil ede rastgele spin konfigürasyonu	25
Şekil 2.2. Taralı plaket örneği	27
Şekil 2.3. S, $x=a$ ve $x=b$ aralığında $y=f(x)$ eğrisinin altında kalan alan olmak üzere yol integrali grafiği	30
Şekil 2.4. Monte Carlo yöntemi (MC) ile Simpson yöntemi ile hesaplanan d boyutlu integrallerin hata payının karşılaştırılması	31
Şekil 2.5. Seçilen örgüdeki spinin bulunduğu taralı olmayan plakete lokal olarak spin yönelimi değişimi (a) uygulanmamış durum (b) uygulanmış durum	33
Şekil 2.6. Kesikli çizgi seçilen Trotter sayısını belirtirken, taralı plaketlerdeki sayılar spin yönelimi değişimi (a) öncesinde verteks ağırlıkları (b) sonrasında oluşan yeni hallerin verteks ağırlıklarını belirtmektedir.....	34
Şekil 2.7. Kesikli çizgi seçilen gerçek uzay noktasını belirtirken, taralı plaketlerdeki sayılar spin yönelimi değişimi (a) öncesinde verteks ağırlıkları (b) sonrasında oluşan yeni hallerin verteks ağırlıklarını belirtmektedir.....	34
Şekil 2.8. Sekiz olası 4'lü spin-1/2 durumları ve verteks ağırlıkları (W_i): üstteki sıra siyah noktalar yukarı yönlü beyaz noktalar ise aşağı yönlü spinleri temsil etmektedir	39
Şekil 2.9. olası 4'lü spin-1/2 durumlarının verteks okları gösterimi	39
Şekil 2.10. 4'li spin-1/2 durumlarının plaket kırılmaları.....	39
Şekil 2.11. Loop algoritması ile bir güncelleme örneğinin (a) dünya çizgileri ile gösterimi (b) verteks okları ile gösterimi	40
Şekil 2.12. İki dünya çizgisinin lokal olarak değiştirilmesi (a) ayırık imajiner zaman (b) sürekli imajiner zaman	43

Şekil 2.13. Dünya çizgileri (a) ayrık imajiner zaman gösterimi (b) sürekli imajiner zaman gösterimi	43
Şekil 2.14. Loop algoritması güncelleme örneği.....	43
Şekil 3.1. $J_x=2$, $J_y=1$, $J_z=0$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5$ harici manyetik alanı altında sıcaklığa bağlı olarak (a) enerji yoğunluğu (b) manyetik duygunluk (c) spin başına mıknatıslanma.....	58
Şekil 3.2. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5$ harici manyetik alanı altında sıcaklığa bağlı olarak (a) enerji yoğunluğu (b) manyetik duygunluk (c) spin başına mıknatıslanma.....	59
Şekil 3.3. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) spin başına mıknatıslanma (b) enerji yoğunluğu.....	60
Şekil 3.4. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	60
Şekil 3.5. $D=0.25$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	62
Şekil 3.6. $D=0.5$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	62
Şekil 3.7. $D=0.75$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	62
Şekil 3.8. $D=1$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	63

Şekil 3.9. $D=2$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	63
Şekil 3.10. $D=4$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	64
Şekil 3.11. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D = 0, 1, 2, 4$ (b) $D = 0.25, 0.5, 0.75, 1$	64
Şekil 3.12. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$ (b) $D=0, 1, 2, 4$	65
Şekil 3.13. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	66
Şekil 3.14. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	66
Şekil 3.15. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	67
Şekil 3.16. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	67
Şekil 3.17. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	68
Şekil 3.18. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	68
Şekil 3.19. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	69

Şekil 3.20. En yakın 20 komşu ve $B_z=0$ için dolaşıklığın alt sınırı (a) $T=0.1$ (b) $T=0.5$ (c) $T=3.5$ (d) $T=1$	69
Şekil 3.21. $B_z=0.5$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi	70
Şekil 3.22. $B_z=2$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi	71
Şekil 3.23. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) spin başına mıknatıslanma (b) enerji yoğunluğu.....	72
Şekil 3.24. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın üst sınırı (b) dolaşıklığın alt sınırı.....	73
Şekil 3.25. $D=0.25$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	74
Şekil 3.26. $D=0.5$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	74
Şekil 3.27. $D=0.75$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	75
Şekil 3.28. $D=1$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	75
Şekil 3.29. $D=2$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	76

Şekil 3.30. $D=4$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	76
Şekil 3.31. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$	77
Şekil 3.32. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$	77
Şekil 3.33. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$	77
Şekil 3.34. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$	78
Şekil 3.35. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$	78
Şekil 3.36. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı 79	
Şekil 3.37. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	79
Şekil 3.38. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	80
Şekil 3.39. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	80
Şekil 3.40. En yakın 20 komşu ve $B_z=0$ için dolaşıklığın alt sınırı (a) $T=3.5$ (b) $T=1$ (c) $T=0.1$ (d) $T=0.5$	81

Şekil 3.41. $B_z=0.5$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi	82
Şekil 3.42. $B_z=2$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi	83
Şekil 3.43. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5$, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) spin başına mıknatıslanma (b) enerji yoğunluğu.....	84
Şekil 3.44. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın üst sınırı (b) dolaşıklığın alt sınırı.....	85
Şekil 3.45. $D=0.25$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	85
Şekil 3.46. $D=0.5$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	86
Şekil 3.47. $D=0.75$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	86
Şekil 3.48. $D=1$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	87
Şekil 3.49. $D=2$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	87
Şekil 3.50. $D=4$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	88

Şekil 3.51. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	88
Şekil 3.52. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	89
Şekil 3.53. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	89
Şekil 3.54. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	90
Şekil 3.55. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	90
Şekil 3.56. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	91
Şekil 3.57. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	91
Şekil 3.58. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	92
Şekil 3.59. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	92
Şekil 3.60. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	93
Şekil 3.61. En yakın 20 komşu ve $B_z=0$ için dolaşıklığın alt sınırı (a) $T=0.1$ (b) $T=0.5$ (c) $T=1$ (d) $T=3.5$	93
Şekil 3.62. $B_z=0.5$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi	94

Şekil 3.63. $B_z=2$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi	95
Şekil 3.64. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) spin başına mıknatıslanma (b) enerji yoğunluğu.....	96
Şekil 3.65. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	97
Şekil 3.66. $D=0.25$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	98
Şekil 3.67. $D=0.5$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	98
Şekil 3.68. $D=0.75$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	99
Şekil 3.69. $D=1$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	99
Şekil 3.70. $D=2$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	100
Şekil 3.71. $D=4$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı.....	100
Şekil 3.72. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	100

Şekil 3.73. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	101
Şekil 3.74. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	101
Şekil 3.75. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	102
Şekil 3.76. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$	102
Şekil 3.77. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	103
Şekil 3.78. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	103
Şekil 3.79. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	104
Şekil 3.80. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	104
Şekil 3.81. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı	105
Şekil 3.82. En yakın 20 komşu ve $B_z=0$ için dolaşıklığın alt sınırı (a) $T=0.1$ (b) $T=0.5$ (c) $T=1$ (d) $T=3.5$	105
Şekil 3.83. $B_z=0.5$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi	107
Şekil 3.84. $B_z=2$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi	108

TABLO LİSTESİ

Tablo 1.1. İki parçacık için spin bileşenleri eşleşmesi.....	6
---	---



1. GİRİŞ ve AMAÇ

1.1. Kuantum Mekanikinin Temel Ön Kabulleri

Kuantum mekaniğinin temel ön kabullerini doğru algılayabilmek için önce bilimin bu yöndeki tarihsel gelişimine bir göz atmak faydalı olacaktır. Öncelikle ışık dalgasına ilişkin Robert Hooke, Christiaan Huygens ve Leonhard Euler'in deneysel gözlemlere dayanarak önerdikleri bir ışık teorisi mevcuttur. Bunu 1803 yılında Thomas Young'ın ışık ve renklerin doğasını anlamak amaçlı gerçekleştirdiği ünlü çift yarık deneyinin yayınlandığı makale takip edecektir. Bu deney ışığın dalga teorisinin genel kabul görmesinde büyük rol oynamıştır.

1838'de Michael Faraday katot ışınlarını keşfetti. 1859 yılında Gustav Kirchhoff'un kara cisim radyasyonu problemini, Ludwig Boltzmann'ın 1877'deki bir fiziksel sistemin enerji durumlarının ayırık olabileceğini önermesi ile Max Planck'ın 1900'da kuantum hipotezi izlemiştir (Planck Max, 1900). Planck'ın, enerjinin "quanta" (veya enerji paketleri) şeklinde yayıldığı ve soğurulduğu hipotezi, gözlemlenen kara-cisim radyasyonu modeliyle tam olarak uyumaktadır (Mehra, J., Rechenberg, 1982).

1896'da Wilhelm Wien, kara-cisim radyasyonu için ampirik olarak bir dağılım yasası belirlemiştir (Wien'in yasası) (helge krack, 2002). Ludwig Boltzmann ise Wien'den bağımsız olarak Maxwell denklemlerinden hareketle aynı sonuca vardı. Fakat bu sonuç sadece yüksek frekanslarda geçerliydi. Planck, Boltzmann'ın istatistik yaklaşımı kullanarak modeli tüm frekanslara uygun hale getirdi ve kuantum mekaniğinin gelişmesinde öneme haiz Planck kuralı olarak bilinen yasayı önerdi. 1900-1910 civarında, atom teorisi ve ışığın parçacık teorisi bilimsel olarak kabul görmeye başladı.

1913'te Peter Debye, Niels Bohr'un atomik yapı teorisini genişleterek eliptik yörüngelerden bahsetti (Arunan, 2010). Bu evre eski kuantum teorisi olarak bilinen fiziğe ev sahipliği yapmıştır. Planck kuantum hipotezini matematiksel bir "kurnazlık" ile doğru cevaplar bulmak için ele almıştır. Albert Einstein ise Planck'ın bu fikrini fotoelektrik olayı açıklamak için kullanmıştır. (Madde üzerine düşen ışık elektron koparır) Fizik alanında Nobel ödülünü aldığı bu çalışma ile ışık gibi elektromanyetik dalgaların da frekansa bağlı olarak enerjinin kuantumu gibi parçacık (daha sonra foton olarak adlandırılacak) olarak tanımlanabileceğini gösterecekti. 1925 yazında Bohr ve

Heisenberg eski kuantum teorisi devrini kapatan sonuçlarını yayınladılar. Işık kuantalarına artık foton denilmekteydi (1926). Böylece, kuantum fiziği, tüm ‘savunmasızlığı’ ile vücut bulmuş ve 1927’de Beşinci Solvey Konferansı’nda daha geniş bir kabul görmüştür. Atomaltı parçacıkların ve elektromanyetik dalgaların sadece parçacık veya sadece dalga olmadığı her iki durumunda bazı özelliklerini taşıdığı keşfedildi. Dalga-parçacık ikiliği kavramı olarak adlandırılan bu bilgiyi 1930 larda kuantum mekaniğinin formalizmi çabaları izledi. David Hilbert, Paul Dirac ve John von Neumann (Van Hove, 1958) ölçüm, gerçeklik üstüne bilgimizin istatistiksel doğası ve gözlemci hakkındaki felsefi spekülasyonlar üzerinde büyük bir özenle durarak kuantum mekaniğini formalizmi ve bütünlüğünü sağlama açısından önemli çalışmalar yapmıştır. Bununla birlikte fizikte ve kimyada birçok alanın altını matematiksel bir iskelet ile dolduran kuantum mekaniği yarıiletken fiziği, yoğun madde fiziği, çok parçacıklı sistemler gibi konularda önemli bir noktada bulunmaktadır. Kuantum mekaniğinin postülaları altı ana başlıkta toplanarak incelenebilir.

1-) Kuantum mekaniksel bir sistemin hali, parçacığın (parçacıkların) koordinatlarına ve zamana bağlı bir $\psi(\mathbf{r}, t)$ fonksiyonu ile temsil edilir. Bu fonksiyona, dalga fonksiyonu veya hal fonksiyonu denir. t anında $\mathbf{r}$ lokasyonunda $d\tau$ hacim elemanında parçacığın bulunma olasılığı $\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) d\tau$ ile ifade edilir. Dalga fonksiyonu, tek değerli, sürekli ve sonlu olmalıdır. Normalizasyon koşulu ise Denklem 1.1’de verildiği gibidir.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d\tau = 1 \quad (1.1)$$

2-) Kuantum mekaniğinde her ölçülebilir büyüklük dinamik bir değişkendir ve bu değişkenlere karşılık gelen lineer ve hermitik bir operatör ($\hat{A}$) mevcuttur.

3-) Bir A gözlenebilirine karşılık gelen Hermitesel işlemci $\hat{A}$ ise, A ’nın bir kesin ölçümünün olası sonucu $\hat{A}$ ’nın kesikli veya sürekli özdeğerlerinden biridir. A ’nın bir ölçümü, $\hat{A}$ ’nın bir $\mathbf{a}_i$ özdeğerini vermiş ise sistem $\hat{A}$ ’nın $\mathbf{a}_i$ özdeğerine karşılık gelen ψ_i , öz durumundadır. Bu postüla kuantum mekaniğinin merkez noktasını işgal etmiştir. Çünkü dinamik değişkenlerin değerleri kuantizedir. Bununla birlikte ölçümler herhangi bir özdeğere tekabül etse bile sistem en başta $\hat{A}$ ’nın öz durumunda bulunmuş olmak zorunda değildir. Keyfi bir hal $\hat{A}$ ’nın öz durumları kümesi üzerinden tanımlanabilir. Bir diğer önemli husus ise ölçümün sistemin halini etkilemesidir.

$$\hat{A}\psi_i = a_i\psi_i \quad (1.2)$$

4-) Eğer sistem normalize dalga fonksiyonu ψ ile temsil ediliyorsa $\hat{A}$ ile alakalı gözlenebilirin ortalama değeri,

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \psi d\tau \quad (1.3)$$

5-) İzole bir kuantum sisteme ait halin ($|\psi\rangle$) zamanla gelişimi ($t_1(|\psi\rangle) \rightarrow t_2(|\psi'\rangle)$), U üniter operatörü ile belirlenir. ($|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$) Schrödinger denklemi ile tanımlı bir sistem için $\hat{H}$, hermitik özellikteki hamiltoniyen ve $\hbar$, Planck sabiti olmak üzere

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \quad (1.4)$$

denklemi ile zamanla değişim belirlenir.

6-) Toplam dalga fonksiyonu, bir fermiyonun durum fonksiyonu bir diğer fermiyonunki ile olan değişimi açısından antisimetrik olmalıdır. Elektronun spini bu koordinat kümesine dahil edilmelidir. Pauli dışarlama ilkesi *antisimetri ilkesinin* doğal bir sonucudur.

1.2. Fiziksel Gerçeklik ve EPR Paradoksu

Albert Einstein, kuantum mekaniğinin kurucularından biri olarak, determinizm ve nedenselliğin reddedilmesi gibi kuantum mekaniğinin bazı felsefi veya metafizik yorumlarını kabul etmedi. “Tanrı zar atmaz” dediğini hatırlayalım (Harrison, 2000). Fiziksel bir sistemin halinin ölçülmesinin deneysel bir düzenlemeye bağlı olduğu durumu reddetmiştir. Yerellik ilkesi üzerinde ısrarcı olan Einstein ile Bohr’un tartışmaları Copenhagen yorumunda kritik önemi haizdir. Copenhagen yorumuna göre, fiziksel sistemler genellikle ölçülmeden önce kesin özelliklere sahip değildir ve kuantum mekaniği, ölçümlerin belirli sonuçlar doğurma olasılıklarını yalnızca tahmin edebilir. Ölçüm eylemi, sistemi etkilemekte ve olasılıklar kümesinin ölçümden hemen sonra olası değerlerin yalnızca birine indirgenmesine neden olmaktadır. Bu özellik dalga fonksiyonu çökmesi olarak bilinir. Einstein kuantum mekaniğinin geçerliliğini sürdürmekle beraber kuantum fenomenisi için tamamlanmamış bir teori halinde olduğunu savunuyordu. Albert Einstein ve meslektaşları Boris Podolsky ve Nathan

Rosen (EPR), dalga işlevinin fiziksel gerçekliğin tam bir tanımını sağlamadığını ve dolayısıyla Copenhagen yorumunun tatmin edici olmadığını gösterdiğini iddia ettiği bir makale yayınladı (Einstein, Podolsky, & Rosen, 1935). Bu makalenin sonuçları, kuantum mekaniğinin yorumlanması için önemli etkilere sahiptir. Paradoksun özü, parçacıkların, konumlarını ve momentumlarını Heisenberg'in belirsizlik ilkesinin izin verdiğinden daha fazla ölçülebileceği şekilde etkileşime girebilmesidir. Tabii ki bir parçacığın diğerinde aniden bu doğruluğu engelleyecek etki yaratmaması önemlidir. Bu durum üzerinde yapılan ölçümün (gözlemin) görelilik teorisinde yasaklandığı üzere bilginin ışıktan daha hızlı taşındığı anlamına gelir. Bu sonuç daha önce fark edilmemişti ve o sırada makul görünmüyordu. Yeni bir fenomenimiz oldu: Kuantum dolaşıklığı. Unutmayalım ki Schrödinger sırasıyla “verschränkung” ve “entanglement” sözcükleri ile ilk kez “dolaşıklık” kavramını 1935 yılında yayınladığı makalelerinde kullanmıştır. Bileşke bir kuantum sistemi oluşturan alt sistemler arasında korelasyon olduğu ve alt sistemlerin dolaşık olduklarını belirtmiştir.

EPR, gerçeklik üzerine değerli bir yaklaşım sergiledi: Kuantum hal ve gözleniri üzerinde herhangi bir ölçüm yapmadan önce ölçüm değerinin kesin olarak tahmin etme olasılığı gerçekliği oluşturmaktadır. Bununla birlikte aralarında uzaysal mesafe bulunan iki sistemin birbirleri üzerinde herhangi bir etki yaratmayacağı öngörülmüştür. (Lokale etkiler) Ayrıca tüm bu hipotezleri bir düşünce deneyi ile ortaya koymuşlardır. Mesela iki parçacıklı bir sistemde, birinin momentumu ölçelim. Bu ölçüm bilgisi ile diğerinin momentumu başka bir ölçüme gerek kalmadan öngörülebilir. Bu durum konum ölçümü yapıldığında da geçerli olacaktır. Klasik yorum dahilinde bu parçacıkların durumlarını bilmek için önce ölçüm yapmak gerekir; aksi takdirde herhangi bir gerçeklik taşımazlar. Bu durum EPR makalesine göre “yerellik” ilkesinin ihlaline sebep olmaktadır. Buradaki yerel (lokal) kelimesiyle kesin olarak bir yerde bulunma durumu ifade edilmektedir.

Kuantum korelasyonlar, dolaşık durumların bileşenlerinden ölçüm sonucu elde edilen olası sonuçlar arasında oluşmaktadırlar. Aslında dolaşık sistemlerin oluştuğu andan itibaren kuantum korelasyonların varlığından bahsedilebilir. İki parçalı bir sistem göz önüne alınsın ve bu sistemin bileşenlerinin ayrı ayrı ölçülebileceği üzerine uzaysal olarak yeterince ayrıldıkları kabul edilsin. Çok parçalı ayrılabilir durumlara genelleştirilebilecek ayrılabilir durumlar şu özelliklere sahiptir:

- i. Lokal olarak ayrılabilir durumlar ($|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\emptyset\rangle$) oluşturulabilir. (Bileşenlerin yeterince uzaklaşmış olduğu durumda iki ayrı $|\varphi\rangle$ ve $|\emptyset\rangle$ kuantum durumuna getirmek)
- ii. $\langle\psi|O_1 \otimes O_2|\psi\rangle$,

$$\langle\psi|O_1 \otimes O_2|\psi\rangle = \langle\varphi|O_1|\varphi\rangle \langle\emptyset|O_2|\emptyset\rangle \quad (1.5)$$

şeklinde yazılabilir. Eğer $O_1 \otimes O_2$ ayrılabilir durumda ise beklenen değeri, O_1 ve O_2 'nin beklenen değerlerinin çarpımına eşittir. Burada φ ve $\emptyset$, sırasıyla O_1 ve O_2 'nin farklı bileşenlerini temsil eder.

- iii. Bileşenler arasındaki ölçüm sonuçları birbirini etkilemez. Hatta diğer bileşen üzerindeki ölçümün yapıp yapılmadığı da önemli değildir.

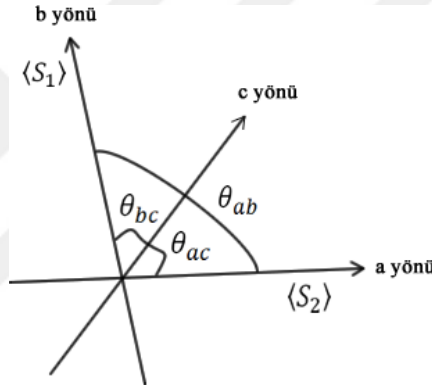
Dolaşık durumlar, ayrılabilir durumların eşfazlı süperpozisyonu olan ayrılmaz durumlar olarak ta tanımlanabilir. Lokal etkileşmeler ile oluşturulamamasının sebebi de budur; bir bozunma sonucu veya bileşenler arasındaki etkileşmeden kaynaklı oluşurlar. Ayrıca dolaşıklık takası ile daha önce birbirleriyle temas etmemiş fakat başka parçacıklarla dolaşık halde olan parçacıklar dolaşık hale getirilebilir. İkinci özellik dolaşık durumlara ait değildir. Ayrıca bileşenler üzerinde yapılan ölçümlerin olası sonuçları birbirine önemli derecede bağlıdır (her birinde ölçüm yapıp yapılmadığı ve ne tür ölçümün yapıldığı).

Aynı kaynaktan zıt yönlerde yayılan iki farklı spin-1/2 durumunda Beyza gözlemcisi birinci parçacığın S^z ölçümünü, Ayla gözlemcisi ise diğer parçacığın S^z ölçümünü yapmaktan sorumlu olsun. Beyza ölçüm sonucunu +1/2 olarak bulduğunda, Ayla'nın yapacağı ölçümün sonucunun -1/2 olacağını ölçüm yapılmadan önce kesinlikle bilecektir. Beyza ölçüm yapmadığı durumda Ayla'nın ölçüm sonucu +1/2 ve -1/2 olmak üzere iki olasılıklıdır. Bileşik sistem için $-x$ projeksiyonu seçilmiş olsun. Spin-singlet durumu $|\varphi^-\rangle$,

$$|\varphi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle - |10\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x^-; x^+\rangle - |x^+; x^-\rangle) \quad (1.6)$$

Beyza ilk parçacığın hem S^z hem de S^x ölçümünü yapabilsin; Ayla ise sadece diğer parçacık ve sadece S^x 'i ölçebilsin. Bu durumda, Beyza S^z 'yi, Ayla da S^x 'i ölçer ise iki ölçüm arasındaki korelasyonlar oldukça rastgeledir. Her iki gözlemci S^x 'i ölçer ise

aralarında ters işaretli korelasyon tam olasılıkla (%100) bulunur. Beyza herhangi bir ölçüm yapmaz ise Ayla'nın ölçüm sonuçları rastgeledir. Beyza ve Ayla, S^z ve S^x 'i ölçecekleri zaman elde edecekleri sonuçlar bellidir (Sakurai & Commins, 1995). Beyza ile Ayla birbirinden yeterince ayrılmış olabilir ve herhangi bir şekilde birbirlerinden haberdar olmayabilir. Bununla birlikte ilk parçacığın ölçüm sonucu diğer parçacık tarafından biliniyor denebilir. Bu durumun kuantum mekaniksel yorumunu yapmak gerekirse Beyza'nın yaptığı ölçüm tamamıyla bir seçim sürecinden geçerek yapılmıştır. İlk paracık için S^z pozitif ölçülmüş ise seçilen bileşen $|z^+; z^- \rangle$ 'dir. İkinci parçacığın S^z bileşeni ölçümü sistemin aynı durumda olduğunu belirler. Herhangi bir parçacık üzerindeki ölçüm aslında tüm sistemi bağlamaktadır. Yani ölçüm tüm sistem üzerinde yapılmaktadır.



Şekil 1.1. a,b ve c kuantizasyon eksenleri olmak üzere bu yönler arasındaki açılar

Durumu biraz daha ayrıntılı incelemek gerekirse 3 adet birim vektör ele alınsın. Bu vektörler de $\vec{a}, \vec{b}$ ve $\vec{c}$ olmak üzere birbirlerine dik olmasın. Parçacıklardan herhangi birinin tipi $(a-, b+, c+)$ şeklinde ise $\vec{S} \cdot \vec{a}$ ölçüldüğünde sonuç mutlaka " - ", $\vec{S} \cdot \vec{b}$ ölçüldüğünde sonuç mutlaka " + " ve $\vec{S} \cdot \vec{c}$ ölçüldüğünde sonuç mutlaka " + " olacaktır. Diğer parçacığın durumu $(a+, b-, c-)$ ise toplam açısal momentumun sıfır olduğu aşıkardır. Tablo 1.1'de tüm olası eşleşmeler bulunmaktadır.

Tablo 1.1. İki parçacık için spin bileşenleri eşleşmesi

Sayı	1. parçacık	2. parçacık
N ₁	$(a+, b+, c+)$	$(a-, b-, c-)$
N ₂	$(a+, b+, c-)$	$(a-, b-, c+)$
N ₃	$(a+, b-, c+)$	$(a-, b+, c-)$

N_4	$(a+, b-, c-)$	$(a-, b+, c+)$
N_5	$(a-, b+, c+)$	$(a+, b-, c-)$
N_6	$(a-, b+, c-)$	$(a+, b-, c+)$
N_7	$(a-, b-, c+)$	$(a+, b+, c-)$
N_8	$(a-, b-, c-)$	$(a+, b+, c+)$

Beyza'nın $\vec{S}_1 \cdot \vec{a}$ ölçümünü “+” bulma, Ayla'nın da $\vec{S}_2 \cdot \vec{b}$ ölçümünü “+” bulma olasılıkları $P(a+; b+)$ (Denklem 1.7) ile temsil edilsin. Bu durum gerçekleştiğinde parçacık çiftlerinin sayısı $N_3 + N_4$, $N_i \geq 0$ olduğu hesaba katıldığında Denklem 1.7 ile ifade edilebilir.

$$N_3 + N_4 \leq N_2 + N_4 + N_3 + N_7 \quad (1.7)$$

$$P(a+; b+) = \frac{(N_3+N_4)}{\sum_i^8 N_i}$$

$$P(a+; c+) = \frac{(N_2+N_4)}{\sum_i^8 N_i} \quad (1.8)$$

$$P(c+; b+) = \frac{(N_3+N_7)}{\sum_i^8 N_i}$$

Denklem 1.7 deki ifadeden hareketle yazılan Denklem 1.9 ifadesi Bell eşitsizliğidir (Bell, 1964).

$$P(a+; b+) \leq P(a+; c+) + P(c+; b+) \quad (1.9)$$

Bu eşitsizlik Einstein'ın yerellik ilkesinden hasıl olmuştur. Herhangi bir lokal realistik modelin bu eşitsizliğe uyması gerekmektedir.

1.3. Gizli Değişkenler, Bell Teoremi ve Kuantum Dolaşıklığı

“Gizli değişkenler” kavramı, David Bohm ve Louis de Broglie tarafından ileri sürülmüş teoriler ile kuantum mekaniğinin tamamlanmamış olduğu fikrinden ortaya çıkmıştır. İlk başta John von Neumann'ın çalışmaları gizli değişkenlerin varlığı konusundaki sayfayı kapatmış gibi görünüyordu. Fakat, 1964 yılında Bell'in, deterministik görüşü (klasik görüş) yerel gizli değişkenler modeli yardımıyla formülize etmesi işin seyrini değiştirdi. Sonrasında Bell, “yerel” gizli değişken teorisinin, yerelliğin ya da kuantum teorisinin

doğruluğunun deneysel olarak test edilebilirliğini ortaya koydu. Bunun yanında bazı dolaşık kuantum durumlarının ölçümleri yapıldığında, sonuçlardan elde edilen olasılıkların Bell eşitsizliğine uymadığı gösterilmiştir. Bu şekilde dolaşıklığın, kuantum formalizminin belirleyici bir özelliği olduğu sonucuna varmıştır.

Denklem 1.8 ile verilmiş olan olasılıklardan ilki hesaplınsın. Beyza gözlemcisi $\vec{S}_1 \cdot \vec{a}$ sonucunu pozitif olarak ölçsün. Aradaki korelasyondan ötürü Ayla, $\vec{S}_2 \cdot \vec{a}$ sonucunu mutlaka negatif olarak ölçecektir. Öncelikle $\vec{a}$ ve $\vec{b}$ vektörleri arasındaki açı θ_{ab} olarak belirlensin. Bununla birlikte bir $\vec{c}$ vektörü de diğer vektörler ile arasında θ_{bc} ve θ_{ac} açısını bulundursun. İkinci parçacık “-” özdeğere sahip $\vec{S}_2 \cdot \vec{a}$ ’nın bir özetinde iken $\vec{S}_2 \cdot \vec{b}$ ölçüldüğünde sonucun “+” olma olasılığı,

$$\cos^2 \left[\frac{\pi - \theta_{ab}}{2} \right] = \sin^2 \left[\frac{\theta_{ab}}{2} \right] \quad (1.10)$$

olarak bulunur. Böylece $P(a+; b+)$, Denklem 1.11 deki halini alır.

$$P(a+; b+) = \frac{1}{2} \sin^2 \left[\frac{\theta_{ab}}{2} \right] \quad (1.11)$$

Bell eşitsizliği Denklem 1.9 kullanılarak tekrar yazıldığında Denklem 1.12 ifadesi elde edilir.

$$\sin^2 \left[\frac{\theta_{ab}}{2} \right] \leq \sin^2 \left[\frac{\theta_{ac}}{2} \right] + \sin^2 \left[\frac{\theta_{cb}}{2} \right] \quad (1.12)$$

Bu eşitsizliğin sürekli sağlanmayacağı aşıkardır. $\theta_{ab} = 2\theta, \theta_{ac} = \theta_{bc} = \theta$ olarak ele alındığında,

$$\sin^2[\theta] \leq 2 \sin^2 \left[\frac{\theta}{2} \right] \quad (1.13)$$

elde edilir. Burada değişik θ ($\theta = \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{4}$) değerleri için eşitsizlik sağlanmamaktadır. Bu durumda kuantum mekaniği, Bell eşitsizliği ile uyumlu çalışmamaktadır.

İlk Bell testleri, 1972 yılında CH74 eşitsizliğinin farklı bir türü olan Freedman eşitsizliği kullanılarak yapılmıştır (Freedman & Clauser, 1972). Alain Aspect, üç bell testini kalsiyum kaynaklar ile yürütmüştür. İlki ve ikincisi CH74 (Clauser-Horne-1974) eşitsizliklerini(Clauser & Horne, 1974) kullanırken, ikincisini ise CSCH (Clauser-

Horne-Shimony-Holt) eşitsizliğinin (Clauser, Horne, Shimony, & Holt, 1969) ilk uygulaması olmuştur. Üçüncüsü ise John Bell'in öne sürdüğü gibi yapılmıştır (Aspect, Dalibard, & Roger, 1982; Aspect, Grangier, & Roger, 1981).

Geneva 1998 Bell testi deneyleri ile uzaklığın dolaşıklığı yok etmediği gösterilmiştir. Bu deneylerde ışık fiber optik kablolarla birkaç kilometre uzaklığa gönderilmiştir (Tittel, Brendel, Gisin, et al., 1998; Tittel, Brendel, Zbinden, & Gisin, 1998). 1998 yılında Innsbruck'ta Weihs ve ekibi, Anton Zeilinger'in danışmanlığında, Aspect'in 1982 deneylerini geliştirerek, lokallığın açık bıraktığı kapıyı ustaca hazırlanmış bir deney ile kapatmıştır. Bu test ile CHSH eşitsizlikleri 30'un üzerinde standart sapma ile ihlal etmiştir (Weihs, Jennewein, Simon, Weinfurter, & Zeilinger, 1998). Pan ve arkadaşları yeni Bell-tipi deneylerini ikiden fazla parçacık üzerinde ilk yapanlardır. Üç parçacık için GHZ (Greenberger-Horne-Zeilinger) durumunu kullanmıştır (Jian-Wei, Bouwmeester, Daniell, Weinfurter, & Zeilinger, 2000). Üç parçacık için GHZ durumu Denklem 1.14 ile verildiği gibidir.

$$|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|000\rangle + |111\rangle) \quad (1.14)$$

Rowe (Rowe, Kielpinski, Meyer, & Sackett, 2001), Gröblacher (Groblacher et al., 2007), Salart (Salart Subils, Baas, Van Houwelingen, Gisin, & Zbinden, 2008), Ansmann (Ansmann et al., 2009), Giustina (Giustina et al., 2013), Christensen (Christensen ve ark., 2013), Johannes Handsteiner (Handsteiner ve ark., 2017) lokal-realite ve dolaşıklık için önemli deneylere imza atmıştır. Dolaşıklık ve Bell eşitsizliklerinin ihlali üzerine yapılan son deneylerden birini Rosenfeld ve arkadaşları gerçekleştirmiştir. Aralarında 398 metre mesafe bulunan iki atomun dolaşık spin durumlarını kullanarak Bell eşitsizliklerinin ihlalini gözlemlemişlerdir (Rosenfeld ve ark., 2017).

Peki dolaşıklığı nasıl ifade edebiliriz? İki alt parçalı (A ve B) bir bileşke sistem ($|\Psi_{AB}\rangle$) düşünelim. $|\Psi_{AB}\rangle$ bileşke sistemi $|\Psi_A\rangle$ ve $|\Psi_B\rangle$ hallerinin tensörel çarpımı ile ifade edilebiliyorsa bu bileşke sistem $|\Psi_{AB}\rangle$ haline ayrılabilir hal denir. Bu tip haller için dolaşıklıktan bahsedilemez. Eğer bu bileşke $|\Psi_{AB}\rangle$ hali iki farklı alt sistemin (A ve B) hallerinin tensörel çarpımı şeklinde ifade edilemiyorsa bu bileşke sistemin haline dolaşık hal denir.

$$|\Psi_{AB}\rangle \neq |\Psi_A\rangle \otimes |\Psi_B\rangle \quad (1.15)$$

İki parçalı dolaşık haller üzerine yapılan çalışmalar, dolaşık durumların tayininin genel kavramlarının öne sürülmesi olanağını vermektedir.

- i. Saf Hallerin Dolaşıklığı:** İki kuantum sistemi verilsin. İlki Ayla adında bir fizikçiye, diğeri ise Beyza isimli diğeri fizikçiye ya ait olsun. Ayla'nın sisteminin fiziksel durumları Hilbert uzayında d_A boyutlu $\mathbf{H}_A$ uzayında; Beyza'nın sisteminin fiziksel durumları ise d_B boyutlu $\mathbf{H}_B$ uzayında tanımlanabilir olsun. Tüm parçaların bileşke sistemi vektörler ile $\mathbf{H}=\mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B$ iki uzayın tensör çarpımı şeklinde tanımlanır. Böylece $\mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B$ de herhangi vektör Denklem 1.16'deki gibi yazılabilir.

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j=1}^{d_A, d_B} C_{ij} |\mathbf{a}_i\rangle \otimes |\mathbf{b}_j\rangle \in \mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B \quad (1.16)$$

Notasyonu basitleştirmek için vektörlerin tensör çarpımları sıklıkla

$$|\mathbf{a}\rangle \otimes |\mathbf{b}\rangle \equiv |\mathbf{a}\rangle |\mathbf{b}\rangle \equiv |\mathbf{ab}\rangle \quad (1.17)$$

biçiminde yazılır. $|\mathbf{a}\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ve $|\mathbf{b}\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ olmak üzere iki durumun tensör çarpımı,

$$|\mathbf{a}\rangle \otimes |\mathbf{b}\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle |\downarrow\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle \quad (1.18)$$

şeklinde örneklenebilir. Saf durumlar için dolaşıklık tanımı şu şekildedir: Bir saf $|\Psi\rangle \in \mathbf{H}$ hali için,

$$|\Psi\rangle = |\varphi^A\rangle \otimes |\varphi^B\rangle \quad (1.19)$$

$|\varphi^A\rangle \in \mathbf{H}_A$ ve $|\varphi^B\rangle \in \mathbf{H}_B$ durumları bulunabiliyorsa bu hal ayrıştırılabilir ya da çarpım durumu olarak adlandırılır. Aksi takdirde $|\Psi\rangle$ hali dolaşıktır. Çarpım durumlarının fiziksel tanımı o halde korelasyon bulunmadığı anlamına gelir. Bir çarpım durumu lokal olarak kolayca şu şekilde hazırlanabilir: Ayla, $|\varphi^A\rangle$, Beyza ise $|\varphi^B\rangle$ hallerini bağımsız olarak üretsinsin. Ayla, A gözlenebilirini Beyza ise B gözlenebilirini ölçtüğünde farklı çıktıların olasılıkları çarpanlarına ayrılabilir. Böylece Ayla'nın ölçüm çıktıları, Beyza tarafından algılanan çıktılara bağlı

değildir. Saf dolaşık durumlara örnek olarak dört Bell durumu (Denklem 1.20) verilebilir.

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{\varphi}^{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|11\rangle_{AB} \pm |00\rangle_{AB}) \\ |\boldsymbol{\varphi}^{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|11\rangle_{AB} \pm |00\rangle_{AB}) \end{aligned} \quad (1.20)$$

Denklem 1.20 ile verilen Bell durumlarından simetrik olan hal $|\psi^+\rangle$, Denklem 1.21'deki gibi tekrar yazılsın. Bu hal herhangi bir parçacığın spini $\uparrow$ yönlü ölçüldüğünden diğerinin $\downarrow$ yönlü olacağı bilgisini taşımaktadır.

$$|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (1.21)$$

Bu Bell durumu iki parçalı dolaşık sistemlere örnek olarak verilebilir. Şimdi Denklem 1.21 deki ifadenin iki halin tensör çarpımı şeklinde nasıl yazılamayacağını, yani iki hale nasıl ayıramayacağı, dolaşık olduğunu görelim. Denklem 1.21 ifadesi, Denklem 1.22 deki gibi ifade edilebilir.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \quad (1.22)$$

Denklem 1.22 deki spin durumlarını içeren hal, matris formalizmi ile tekrar ifade edildiğinde (Denklem 1.23) Denklem 1.24 deki halini alır.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \quad (1.23)$$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

Denklem 1.24 deki ifade edilen hal eğer dolaşık ise iki hale ayrılabilmelidir, Denklem 1.19 daki gibi yazılabilmelidir. $|\boldsymbol{\varphi}^A\rangle$ ve $|\boldsymbol{\varphi}^B\rangle$, Denklem 1.25 deki gibi tanımlansın.

$$|\boldsymbol{\varphi}^A\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad |\boldsymbol{\varphi}^B\rangle = \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha\gamma \\ \alpha\delta \\ \beta\gamma \\ \beta\delta \end{pmatrix} \quad (1.26)$$

Denklem 1.24 de elde edilen sonuç Denklem 1.26 ile iki durumun tensör çarpımı şeklindeki ifadeye eşit olmalıdır ki az önce bahsedildiği gibi $|\Psi\rangle$ dolaşık bir durumu belirtsin.

Eğer dolaşık değil ise ve Denklem 1.24 ve Denklem 1.26 birbirine eşit ise,

$$\begin{aligned} \alpha\gamma &= 0 \\ \alpha\delta &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \beta\gamma &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \beta\delta &= 0 \end{aligned} \quad (1.27)$$

Denklem 1.27 ile eşitlikler sağlanmalıdır. Bu eşitlikler incelendiğinde sembollerin alacağı değerler için birçok olasılık varmış gibi görünür. $\alpha\delta = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ve $\beta\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ele alındığında denklemdeki tüm ifadelerin sıfırdan farklı olmak zorunda olduğu anlaşılmaktadır $\alpha \neq 0, \beta \neq 0, \gamma \neq 0$ (ve $\delta \neq 0$). $\alpha\gamma = 0$ ve $\beta\delta = 0$ incelendiğinde ise çarpanların herhangi biri kesinlikle sıfıra eşit olmalıdır. Sonuç olarak denklem sistemini oluşturan eşitliklerin bir çözüm kümesi yoktur. Bu da Denklem 1.24 ve Denklem 1.26'ün birbirine eşit olamayacağı anlamına gelir; Denklem 1.19'un aksine Denklem 1.15 bu Bell hali için geçerlidir.

Aynı yöntem kullanılarak ayrılabilir hallerin de matematiksel olarak mümkün olabileceği incelensin. Bunun için Denklem 1.28 deki hal ele alınsın.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) \quad (1.28)$$

Bu hal, tensör çarpım şeklinde tekrar yazılırsa Denklem 1.29 eldir ve matris formalizmi de Denklem 1.30 daki gibidir.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle) \quad (1.29)$$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \quad (1.30)$$

$|\Psi\rangle$ halinin son matris temsili Denklem 1.31 deki gibi bulunur.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

Bu hal, Denklem 1.26 'ya eşit olmalıdır ki ayrılabilir bir hal olsun. Bu yüzden Denklem 1.32 eşitliğinden hasıl olan denklem sisteminin çözüm kümesi olabilmelidir.

$$\begin{pmatrix} \alpha\gamma \\ \alpha\delta \\ \beta\gamma \\ \beta\delta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

Denklem 1.32 ile kurulabilecek denklem sistemi,

$$\begin{aligned} \alpha\gamma &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \alpha\delta &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \beta\gamma &= 0 \\ \beta\delta &= 0 \end{aligned} \quad (1.33)$$

Denklem 1.33 de bulunan eşitlikler incelendiğinde ilk iki eşitlikte bulunan çarpanlar sıfırdan farklı olmalıdır ($\alpha \neq 0, \delta \neq 0, \gamma \neq 0$). Bu durum son iki eşitlikteki çarpanların oluşturduğu eşitliklere aykırı bir durum değildir. $\alpha \neq 0$ olması son iki eşitliğe müdahale etmez; $\delta \neq 0$ ve $\gamma \neq 0$ olmaları son iki eşitlikte $\beta = 0$ olması gerektiği anlamına gelir. Bununla birlikte $\gamma = \delta$ olmaktadır. Denklem 1.32 deki bilinmeyenler düzenlendiğinde,

$$\begin{pmatrix} \alpha\gamma \\ \alpha\delta \\ \beta\gamma \\ \beta\delta \end{pmatrix} = \alpha\gamma \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

elde edilir ve $\alpha\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}$ dir. Bu durumda $|\Psi\rangle$, hali ayrılabilir bir haldir; Denklem 1.25 teki hallerin tensör çarpımı (Denklem 1.36) olarak yazılabilmektedir.

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \gamma \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \alpha\gamma \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \right) \quad (1.35)$$

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\rangle \otimes \left(\frac{(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)}{\sqrt{2}} \right) \quad (1.36)$$

$|\varphi^A\rangle$ ve $|\varphi^B\rangle$ halleri Denklem 1.38 deki gibidir.

$$|\varphi^A\rangle = |\uparrow\rangle \quad |\varphi^B\rangle = \frac{(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)}{\sqrt{2}} \quad (1.37)$$

- ii. **Karışık hallerin dolaşıklığı:** Bir kuantum sistem için bilinen sadece belli bir p_i olasılıkla, bazı $|\varphi_i\rangle \in H$ hallerinin birinde bulunabileceğidir. Bu durum bir yoğunluk matrisi ile tanımlanır. $\sum_i p_i = 1$ ve $p_i \geq 0$ için,

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad (1.38)$$

Bu yoğunluk matrisi veya sistemin hali kompleks bir matris ile temsil edilir. Tüm $|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ operatörler pozitif ve hermityen olduğundan dolayı bu matris hermityen ve yarı kesin pozitifdir¹ (positive-semidefinite) ($Tr(\rho) = 1$). Diğer taraftan herhangi bir yarı kesin pozitif matrisin izi bazı hallerin yoğunluk matrisi olarak yorumlanabilir. Bu tüm hallerin oluşturduğu kümenin bir konveks küme olduğuna işaret eder. ρ_1 ve ρ_2 iki hali temsil ediyor ise bu hallerin konveks kombinasyonu,

$$\rho = \alpha\rho_1 + (1 - \alpha)\rho_2 \quad (1.39)$$

$\alpha \in [0; 1]$ olmak üzere bir hali temsil eder. Bu özellik ikiden fazla hallerin kombinasyonu için de geçerlidir. $\sum_i p_i = 1$ ve $p_i \geq 0$ için bu hallerin konveks kombinasyonu, $\sum_i p_i \rho_i$, yine bir hali temsil eder. $\sum_i p_i = 1$ özelliğine sahip $p_i \geq 0$ katsayılar, konveks ağırlıklar² olarak adlandırılır.

ρ , bileşke bir sistemin yoğunluk matrisi olsun. Ayla için ρ^A halleri; Beyza için ise ρ^B halleri bulunuyorsa ρ ,

$$\rho = \rho^A \otimes \rho^B \quad (1.40)$$

çarpım durumu olarak adlandırılır. Eğer p_i konveks ağırlıklar ve çarpım haller $\rho_i^A \otimes \rho_i^B$ ile Denklem 1.41 sağlanıyorsa, ayrılabilir olarak adlandırılır. Aksi takdirde dolaşık olarak adlandırılır.

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^A \otimes \rho_i^B \quad (1.41)$$

Çarpım durumu korelasyon bulunmayan hal olabilir yani Beyza ile Ayla'nın her birinin kendi ayrı hali bulunabilir. Çarpım olmayan durumlar için iki farklı tip

¹ $\forall x \in \mathbb{C}^n$ için, eğer $x^* M x \geq 0$ ise M yarı kesin pozitifdir (positive-semidefinite) denir.

² $V, \mathbb{R}$ üzerinden bir vektör uzayı; X ise V 'nin elemanlarını içeren herhangi bir küme olsun. X' in elemanlarının konveks kombinasyonu, her $x_i \in X$, $\lambda_i \geq 0$ ve $\sum_i \lambda_i = 1$ olan bazı $n > 0$ için $\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \dots \lambda_n x_n$ formunda lineer kombinasyonu olarak tanımlanır.

korelasyon vardır. Ayrılabilir durumlar, klasik olarak ilintilidir (korelasyon mevcut). Bu da ayrılabilir bir halin üretimi için sadece LOCC³ (lokal operasyonların ve klasik iletişim)'in gerekli olduğu anlamına gelir. Beyza ve Ayla, klasik iletişim ile p_i olasılıklı i çıktıları üreten rastgele sayı üreticisini paylaşabilir. Her çıktı için $\rho_i^A \otimes \rho_i^B$ halini lokal olarak üretebilirler. Böylece Denklem 1.41 hali üretilebilir. Bu durum kuantum teorisine has bir durum olmamakla birlikte klasik korelasyon kavramının genel çerçevesini çizer. Eğer bir hal dolaşık halde ise korelasyonlar, bahsedilen klasik prosedürden kaynaklanmaz. Yani dolaşık durumlar kuantum mekaniğinin bir özelliğidir. Karışık hallere örnek olarak Werner hali Denklem 1.42 ile verilmiştir.

$$\rho = \frac{1-\gamma}{4} I \otimes I + \gamma |\varphi^+\rangle\langle\varphi^+| \quad (1.42)$$

Werner hali, $\gamma > 1/3$ (Bennett ve ark., 1996) için dolaşık; $\gamma = 1$ için maksimum dolaşıktır.

1.4. Dolaşıklık Durumlar Nasıl Hazırlanır?

Önceki bölümlerde kadar dolaşıklık üzerine teorik değerlendirilmeler üzerinde durulmuştur. Bu bölümde dolaşık durumların laboratuvar ortamında oluşturulması ve gözlemlenmesini içeren bazı tekniklerden bahsedilecektir. Peki pratikte dolaşık durumlar nasıl oluşturulur?

1.4.1. Aşağı Dönüşüm

Yüksek enerjili fotonlardan (mavi) oluşan lazer ışını, doğrusal olmayan bir optik ortama doğru $-z$ yönünde gönderilsin. Enerji korunduğu için, her foton daha düşük enerjili (kırmızı) fotonlara bölünür. Momentum korunduğu için, tüm kırmızı fotonların $-z$ ekseninden sapması aynıdır ve tam tersi yöndedir. Sonuç olarak kristalin optik çıktısı, görüldüğü bölgede iki noktada kesinlikle kesişen bir çift konidir. Deneysel çıkarım, bu kesişmelerde bireysel polarizasyonların olmadığıdır. Polarizasyonların ölçümler üzerine, H ve V sırasıyla yatay ve dikey polarize ışığı temsil etmek üzere HV-VH dolaşık durumunun belirteci olan korelasyonlar sergilediği fark edilmiştir.

³ Yerel işlemler, Beyza ve Ayla'nın klasik mesajları kullanarak muhtemel senkronizasyon ile sistemin kendi bölümünde gerçekleştirebilecekleri işlemlerdir. Bununla birlikte, birbirlerine kuantum sistemleri gönderemeyebilirler veya bir araya gelip sistem üzerinde ortak bir kuantum işlemi yapamazlar.

1.4.2. Kuantum-Elektrodinamik Kavite

Burada amaç, bir atomu optik bir alan ile bir kovuk içinde dolaşık hale getirmektir. Atom bir radyasyon kutusu içinden geçtiğinde, elektromanyetik vuruların fazlarını ayarlayarak, foton ile atom arasında bir korelasyon oluşturulabilir. Kabaca ya atom uyarılmıştır ve kovukta herhangi bir foton yoktur ya da atom temel seviyede bulunurken kovukta bir foton vardır. Kovukta alanın hali ile atomun halinin dolaşık olduğu gösterilmiştir.

1.4.3. Ayırt Edilemez Parçacıklar

Süslü makine fizikçileri, dolaşık durumları yapay olarak üretmeye alıştırlar. Dolaşık durumlar sadece insanlar tarafından laboratuvar ortamında oluşturulmazlar, doğal olarak her zaman karşınıza çıkabilirler. Para helyum içindeki elektronlar, Denklem 1.21 deki singlet durumunda dolaşık haldelerdir. Aslında dalga fonksiyonunun simetrik hale getirilmesi ihtiyacından kaynaklı olarak, dalga paketlerinin üst üste gelmesi şartıyla, tüm ayırt edilemez parçacıklar dolaşıktır.

1.5. Dolaşıklığın Ölçülmesi: Lokalize Dolaşıklık

Verstraete, F., lokalize dolaşıklığı tanımlayarak korelasyon fonksiyonları ile dolaşıklık arasında yakın bir bağlantı kurmuştur (Verstraete, Popp, & Cirac, 2004). İki parçacığın lokalize dolaşıklığı, sistemin geri kalan kısmında lokal ölçümler yaparak bu iki parçacıkta lokalize olabilen maksimum dolaşıklığın miktarıdır. Tüm olası lokal ölçüm stratejileri üzerinden bir optimizasyona gerek duyulduğundan lokalize dolaşıklığın belirlenmesi çok zordur. Bu yüzden de genel bir tanıma sahip değildir. Buna rağmen Verstraete ve ark, üst ve alt sınırların belirlenmesi için bir yol bulmuşlardır. Bu çalışmanın konusu da daha önce bahsedildiği gibi bir N-qubit sistemin dolaşıklığının üst ve alt sınırlarını belirlemektir. $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ bazlarında 1-qubit hali Denklem 1.43 deki haliyle tanımlanabilir.

$$|\varphi\rangle = a|1\rangle + b|0\rangle \quad (1.43)$$

2-qubit için ise 4 adet olası hal bulunur: $\{|11\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |00\rangle\}$. N-qubit için 2^N olası hal vardır. N=3 yani 3-qubit için $\{|111\rangle, |110\rangle, |101\rangle, |100\rangle, |000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle\}$

olmak üzere 2^3 adet olası hal vardır. N-qubit için genellenmek istenirse haller 1 den 2^N 'e kadar numaralandırıldığında

$$\sum_{m=0}^1 \dots \sum_{j=0}^1 \sum_{i=0}^1 |ij \dots m\rangle \quad (1.44)$$

ifadesi yeterli olacaktır. Bu tez çalışmasında ikili sistemler incelenecektir. Üst sınır yardımcı dolaşıklık ile belirlenirken; alt sınır korelasyon fonksiyonuna bağlıdır. Spinlerin geri kalan kısmında, lokal yerine global ölçümlere izin verilerek elde edilir (Cohen, 1998; DiVincenzo ve ark., 1999; Laustsen, Verstraete, & Van Enk, 2003). Yardımcı dolaşıklık için genel bir ifade olmadığından üst ve alt sınırları belirlemek önemlidir.

Lokale dolaşıklık (LE) için genel bir tanım oluşturmak gerekirse N spinden oluşan saf bir $|\psi\rangle$ hali ele alarak başlanabilir. Lokale dolaşıklık $E_{ij}(\psi)$, diğer spinler (i ve j hariç) üzerinden yapılan lokal ölçümler ile i ve j spinleri arasında yaratılabilecek maksimum dolaşıklık olarak tanımlanır. Her ölçüm tabanı 2^{N-2} elemandan oluşan bir saf durum topluluğu $\varepsilon = \{p_s, |\varphi_s\rangle\}$ 'yi nitelendirir. Burada p_s , N parçalı spin sisteminde yardımcı spinler (sistemin geri kalan kısmı dediğimiz yani i ve j hariç) üzerinde $|s\rangle$ ölçümünü yaptıktan sonra iki-spin durumu $|\varphi_s\rangle$ 'yi elde etme olasılığı olarak ifade edilir. Böylece lokalize dolaşıklık

$$E_{ij} = \max_{\varepsilon} \sum_s p_s E(|\varphi_s\rangle) \quad (1.45)$$

şeklinde ile verilir. Burada $E(|\varphi_s\rangle)$, $|\varphi_s\rangle$ halinin dolaşıklığını belirtir. Üst sınırın yardımcı dolaşıklık ile elde edilebileceğinden bahsedilmişti. Yardımcı dolaşıklığın nasıl hesaplandığı bildirilmiştir (Laustsen ve ark., 2003). Alt sınır daha ilginç bir teorem yardımıyla gösterilmiştir: i ve j spinleri, α ve β yönleri arasında klasik korelasyon ile N qubit' in verilen bir saf ya da karışık hali için diğer spinler üzerinden yapılan ölçümlerle daima korelasyonun ortalamada azalmayacağı yönler mevcuttur. Bu aslında klasik korelasyonları arttıran lokal ölçümlerin daima var olacağı anlamına gelir (Verstraete ve ark., 2004). Ayrıca kriptografi bağlamında kullanışlı olmaktadır (Devetak & Winter, 2004).

1.6. Amaç

Dolaşıklık kuantum bilgi için önemli bir kaynaktır (Bennett & DiVincenzo, 2000). Kuantum bilgisayarlar ve kuantum haberleşmenin kullanılabilir kılınması için en ideal durum katı bir sistemde sonlu sıcaklıkta bir dolaşıklık kaynağı bulmaktır. Heisenberg modeli de basit ve gerçekçi bir model olarak çokça çalışılmış bir katı-hal sistemdir (Eggert, Affleck, & Takahashi, 1994; Hammar ve ark., 1999). Heisenberg etkileşmesinin spin sisteminde lokalize olmadığı bulunmuştur. Bu efektif hamiltoniyen kuantum haberleşme (Lidar, Bacon, & Whaley, 1999) ve C-NOT kapıları için (Zheng & Guo, 2000) kullanılabilir. Termal dolaşıklık izotropik Heisenberg spin zincirinde harici manyetik alan B 'nin yokluğunda (Wang, 2002) ve varlığında (Arnesen, Bose, & Vedral, 2001; Wang, 2001, 2002) üzerine çalışmalar yapılmıştır. Bu sistemde iki qubitin dolaşıklığı T sıcaklığı arttıkça azalmakta ve T_c kritik sıcaklığından sonra yok olmaktadır (Arnesen ve ark., 2001; Wang, 2001). İzotropik N-qubit Heisenberg sisteminde ikili dolaşıklık kesin bir derecede, artan sıcaklık veya B harici alanı ile artabilir (Arnesen ve ark., 2001). Anizotropik XY Heisenberg spin zinciri $B=0$ (Wang, 2001) ve B 'nin sıfırdan farklı olduğu durumlarda (Kamta & Starace, 2002) araştırılmıştır. İki qubit anizotropik XY Heisenberg zinciri için manyetik alanın gücü artırılarak sonlu sıcaklıkta dolaşıklık oluşturulmuştur (Kamta & Starace, 2002). Bununla birlikte artan T veya B ile dolaşıklık iki qubit anizotropik Heisenberg XY zincirinde (Kamta & Starace, 2002) veya N-qubit izotropik Heisenberg zincirinde (Arnesen ve ark., 2001) çok zayıftır. Güçlü dolaşık durumlar elde etmek önem arz etmektedir.

Diğer yandan anizotropik XYZ N-qubit Heisenberg sistemlerde ikili dolaşıklık hesapları hem analitik (O'Connor & Wootters, 2001) hem de simülasyon olarak yapılmıştır. Harici manyetik alanın varlığında ve yokluğunda; sıcaklığa bağlı incelenen ikili dolaşıklık için "concurrence" (Zhou, Song, Guo, & Li, 2003) ve "localizable entanglement" hesaplanmıştır. Zhou ve ark., iki qubit ve üç qubit anizotropik Heisenberg XYZ zincirinde ikili dolaşıklığı hesaplamışlardır (concurrence). Simülasyon çalışmaları ile de hem antiferromanyetik hem de karışık durumlar için lokalize dolaşıklık XYZ Heisenberg sistemlerde çalışılmıştır. Değiş-tokuş etkileşmesi ve harici manyetik alanın katkısı yani Zeeman enerjisi dahilinde dolaşıklık kaynakları aranmıştır (Petros Androvitsaneas, Paspalakis, & Terzis, 2012; Petros Androvitsaneas, Terzis, &

Paspalakis, 2013). Bu tez çalışmasında manyetik dipol-dipol etkileşmesinin eklendiği bir Heisenberg N spin-1/2 zincirinde dolaşıklığın sınırları lokalize dolaşıklık ve yardımcı dolaşıklık kullanılarak belirlenmesi hedeflenmiştir. Dipol-dipol etkileşmesinin sistemde dolaşıklığın sınırlarını nasıl belirlediği ve bunun sıcaklığa (T) bağıllığı incelenmiştir. Kullanılan yöntemler “Materyal ve Yöntem” bölümünde ayrıntılı bir şekilde ifade edilmiştir. İzotropik ve anizotropik Heisenberg spin-1/2 kuantum zincirinde antiferromanyetik, ferromanyetik ve karışık haller için lokalize dolaşıklığın özellikle alt sınırının dipol etkileşmesinin gücüne bağıllığı sistemi oluşturan diğer parametrelerin (değiş-tokuş sabiti ve harici manyetik alan) değişimine bağlı olarak incelenmiştir.





2. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu bölümde Monte Carlo simülasyon metodunun uygulandığı temel algoritmalar, dünya çizgileri algoritması (worldlines) ve loop algoritmasından bahsedilmiştir. Bölüşüm fonksiyonunun hesaplanması için bu çalışmada kullanılmış olan Suzuki-Trotter dekompozisyonu, Zassenhaus formülü açıklanmıştır. Gözlenebilirlerin ölçümü, özellikle dolaşıklığın sınırlarını belirlemek için kullanılacak yöntem belirtilmiştir.

2.1. Spin-1/2 Zinciri ve Kuantum Monte Carlo Formalizmi

2.1.1. Trotter Formülü ve D+1 Boyutlu Klasik Sistem

Sistemi temsil eden hamiltoniyen operatörü takas etkileşmesi, dipol-dipol etkileşmesi ve Zeeman terimini içermektedir. Takas etkileşmesi ve dipol-dipol etkileşmesi en yakın komşu spinler üzerinden hesaba katılmakla birlikte Zeeman terimi yani harici manyetik alan düzgün olmak koşulu ile +z yönünde seçilmiştir. Verteks enerjilerinin ve sonrasında bölüşüm fonksiyonunun hesaplanabilmesi için öncelikle operatörün spin durumlarına kolayca uygulanabilir hale getirilmesi gerekmektedir. Dekompozisyon yöntemi olarak Suzuki-Trotter yöntemi uygulanabilirliği ve etkinliği açısından kuvvetli bir yöntem olduğu için tercih edilmiştir. Stokastik seri açılımı (SSE) da aynı amaç için kullanılabilir olsa da Trotter yaklaşımına göre daha etkisizdir. Stokastik seri açılımının özel bir durumu olan Handscomb metodu (Handscomb, 1964), bölüşüm fonksiyonunun izinin $\beta \hat{H}$ 'nin kuvvet serisi olarak yazılabileceğini gösterse de sadece belli durumlar için bölüşüm fonksiyonunun hesaplanabilirliği yüzünden farklı yöntem arayışına gidilmiştir. Kuantum Monte Carlo yaklaşımları, çok parçacıklı kuantum sistemlerin benzeştirilmesinde çeşitli metotları kapsamaktadır. Bunlardan bazıları varyasyonel Monte Carlo ve difüzyon Monte Carlo olmak üzere taban durumu dalga fonksiyonu hesaplamak için kullanılan metotlardandır. Dünya çizgileri Monte Carlo algoritması, sonlu-sıcaklık metodu olarak çok parçacıklı kuantum sistemin kanonik yoğunluk matrisinin modellenmesinde ve verteks enerjilerinin hesaplanmasında kullanışlılığı açısından güçlü bir algoritmadır. Loop algoritması, spin yönelimlerini değiştirmek için lokal olmayan kümelerin oluşturulmasında ön ayak olup simülasyon zamanını azaltıp kritik yavaşlama problemini çözmektedir. Bu bölümde Suzuki-Trotter dekompozisyonu ve Dünya Çizgileri Monte Carlo algoritması üzerinde durulacaktır. Sonraki bölümde ise

Monte Carlo Yol İntegrali, Zassenhaus Formülü, Negatif işaret problemi ve Loop algoritmasından bahsedilecektir. Loop algoritması ayrık imajiner zaman ve sürekli imajiner zaman olmak üzere ayrı ayrı detaylandırılmıştır.

Dünya çizgileri Monte Carlo algoritmasındaki genel fikir kuantum sistemin klasik sistem ile eşleştirilmesinde çok benzerdir. Sistemi temsil eden hamiltoniyen, $\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i$ birden fazla terime ayrılarak her eksponansiyel terimin, $\beta=1/(k_B \times T)$ olmak üzere, $e^{-\beta \hat{H}_i}$, matris temsillerinin kolayca hesaplanması hedeflenmiştir. Burada k_B , Boltzman sabiti; T ise sıcaklıktır. Denklem 2.1 ile verilen Trotter formülü, kanonik yoğunluk operatörünün dekompozisyonunda kullanılabilir (Suzuki, 1976a, 1976b; H F Trotter, 1959; Hale F Trotter, 1959).

$$e^{-\beta \hat{H}} = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\prod_i e^{-\frac{\beta \hat{H}_i}{M}} \right)^M \quad (2.1)$$

Hamiltoniyenin her biri komütatif olan iki parçaya ayrılmış olduğunu düşünelim.

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B \quad (2.2)$$

$\hat{H}_A(\hat{H}_B)$, sadece çift (tek) katkı kısımlarından oluşmuş olsun.

$$\hat{H}_A = \sum_{i \text{ çift}} \hat{H}_i, \quad \hat{H}_B = \sum_{i \text{ tek}} \hat{H}_i \quad (2.3)$$

$[\hat{H}_A, \hat{H}_B] \neq 0$ yani $\hat{H}_A$ ve $\hat{H}_B$ birbirleriyle sıra değiştirmemesine rağmen bunlara bağlı sınır hamiltonyenleri, tamamı tek ve tamamı çift olan hamiltonyenler aralarında sıra değiştirebilecek şekilde belirlendiği için komütatifler.

$$[\hat{H}_i, \hat{H}_j] = 0 \quad (2.4)$$

Böylece hamiltoniyeni komütatif iki bölüme ayırmış olduk. Denklem 2.1'i uyguladığımızda,

$$e^{-\beta \hat{H}} = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(e^{-\frac{\beta (\hat{H}_A + \hat{H}_B)}{M}} \right)^M \quad (2.5)$$

M , Trotter sayısı ve $\Delta\tau = \beta/M$ olmak üzere, $\hat{H}$ 'nin eksponansiyeli iki komütatif olmayan parça ile ifade edilmiş bulunmaktadır. $\Delta\tau$, Trotter zaman-adımı olarak adlandırılmıştır.

$$e^{-\Delta\tau \hat{H}} = e^{-\Delta\tau (\hat{H}_A + \hat{H}_B)} = \begin{cases} e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \hat{H}_B} + O(\Delta\tau^2) \\ e^{-\Delta\tau \frac{\hat{H}_B}{2}} e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \frac{\hat{H}_B}{2}} + O(\Delta\tau^3) \end{cases} \quad (2.6)$$

Denklem 2.6 ile belirlenen dekompozisyonlardaki hata dereceleri sırasıyla $\alpha=2$ (2. derece yaklaşım) ve $\alpha=3$ (3. derece yaklaşım) tür. 2. derece yaklaşımı kullandığımızda son ifade gayet açık biçimde bellidir. 3. derece yaklaşım kullanıldığında da matris izinin çevirimsel değişmezliğinden kaynaklı aynı sonuca ulaşılabilir. Bölüşüm fonksiyonundaki sistematik hata $M\Delta\tau^3 \propto \Delta\tau^2$ ile ölçeklendirilmiştir. Denklem 2.6' dan da anlaşılacağı üzere ikinci derece yaklaşım kullanılması halinde $O(\Delta\tau)$ kadar bir hata farkı beklenmektedir. Denklem 2.5 ve Denklem 2.6 yardımıyla bölüşüm fonksiyonu $Z = Tr(e^{-\beta\hat{H}})$,

$$Z = Tr \left(\underbrace{e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \hat{H}_B}}_M \underbrace{e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \hat{H}_B}}_{M-1} \dots \underbrace{e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \hat{H}_B}}_1 \right) + O(\Delta\tau^2) \quad (2.7)$$

Hamiltoniyein dekompozisyonundan sonraki aşama spin-1/2 öz durumları, S_i^z , cinsinden Hilbert uzayında bir baz kümesinin ele alınması olacaktır.

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle &= |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle \\ |\varphi_2\rangle &= |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \\ &\vdots \\ |\varphi_{2^N}\rangle &= |\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

Bu baz kümesi bir spin-1/2 zincirinin tüm olası durumlarını, 2^N farklı durumu, temsil etmektedir. Buradan hareketle kapalılık bağıntısı ifadesini tanımlayabiliriz. Denklem 2.9' da bu bağıntı açıkça gösterilmiştir.

$$\sum_{\varphi} |\varphi\rangle\langle\varphi| = 1 \quad (2.9)$$

Bölüşüm fonksiyonu bu baz kümesi üzerinden kapalılık bağıntısı kullanılarak tekrar tanımlandığında,

$$\begin{aligned}
Z &= Tr(e^{-\beta \hat{H}}) = \sum_{\varphi^0} \langle \varphi^0 | e^{-\beta \hat{H}} | \varphi^0 \rangle \\
&\approx \sum_{\varphi^0} \left\langle \varphi^0 \left| \underbrace{e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \hat{H}_B}}_{\hat{M}} \underbrace{e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \hat{H}_B}}_{\hat{M}-1} \dots \underbrace{e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \hat{H}_B}}_{\hat{1}} \right| \varphi^0 \right\rangle \\
&= \sum_{\varphi^0} \langle \varphi^0 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \hat{H}_B} \dots e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} (\sum_{\varphi^1} |\varphi^1\rangle \langle \varphi^1|) e^{-\Delta\tau \hat{H}_B} | \varphi^0 \rangle \\
&= \sum_{\varphi^0} \sum_{\varphi^1} \langle \varphi^0 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} e^{-\Delta\tau \hat{H}_B} \dots (\sum_{\varphi^2} |\varphi^2\rangle \langle \varphi^2|) e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} |\varphi^1\rangle \langle \varphi^1| e^{-\Delta\tau \hat{H}_B} | \varphi^0 \rangle
\end{aligned} \tag{2.10}$$

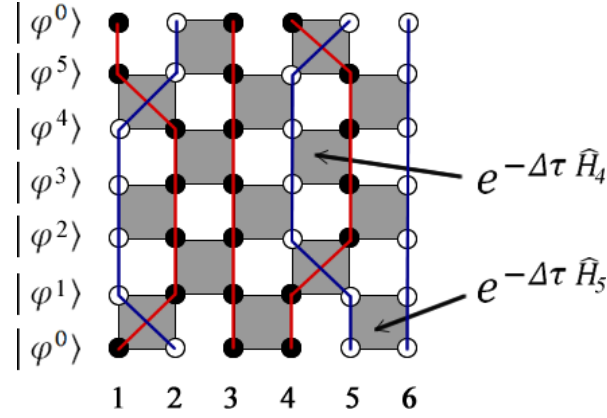
Denklem 2.10 da belirtilen toplamalar $|\varphi^0\rangle$ 'ın izinden kaynaklanan baz kümelerini birbirinden ayırmak için üst simge olarak etiket kullanımı uygun görülmüştür. ($|\varphi^1\rangle, |\varphi^2\rangle, |\varphi^3\rangle$) Bu yöntemle bölüşüm fonksiyonu Z için Denklem 2.11 ifadesi elde edilmiştir.

$$\begin{aligned}
&\sum_{\{\varphi^i\}} \underbrace{\langle \varphi^0 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} | \varphi^{2M-1} \rangle}_{2M} \underbrace{\langle \varphi^{2M-1} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_B} | \varphi^{2M-2} \rangle}_{2M-1} \underbrace{\langle \varphi^{2M-2} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} | \varphi^{2M-3} \rangle}_{2M-2} \dots \\
&\dots \underbrace{\langle \varphi^3 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_B} | \varphi^2 \rangle}_3 \underbrace{\langle \varphi^2 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} | \varphi^1 \rangle}_2 \underbrace{\langle \varphi^1 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_B} | \varphi^0 \rangle}_1 + O(\Delta\tau^2)
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Bölüşüm fonksiyonunun Denklem 2.11 deki ifadesi Suzuki-Trotter dekompozisyonu olarak bilinir. Ising tipi d boyutlu kuantum sistem (Suzuki, 1976b; Suzuki, Miyashita, & Kuroda, 1977) ve (De Raedt & De Raedt, 1983) d+1 boyutlu klasik sisteme dönüştürülmüştür. $\hat{H}_A$ ve $\hat{H}_B$ nin her ikisi de komütatif bölümlerden oluşmaktadır. Böylece Suzuki-Trotter dekompozisyonundaki her eksponansiyel, çift ve tek olarak bölünmüş hamiltonyenlerin çarpımı cinsinden ifade edilir. Bu ifade Denklem 2.12 ve 2.13 de gösterilmiştir.

$$e^{-\Delta\tau \hat{H}_A} = \prod_{i \text{ çift}} e^{-\Delta\tau \hat{H}_i} = e^{-\Delta\tau \hat{H}_2} e^{-\Delta\tau \hat{H}_4} \dots \tag{2.12}$$

$$e^{-\Delta\tau \hat{H}_B} = \prod_{i \text{ tek}} e^{-\Delta\tau \hat{H}_i} = e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} e^{-\Delta\tau \hat{H}_3} \dots \tag{2.13}$$



Şekil 2.1. N=6 spin-1/2 ve Trotter sayısı (M) 5 olan kare spin örgüsü hale gelmiş spin zincirinin bölüşüm fonksiyonunun satranç tahtası dekompozisyonunu temsil eden rastgele spin konfigürasyonu

Şekil 2.1’ de taralı kare şeklindeki bölgeler Denklem 2.12 ve Denklem 2.13 ile belirtilmiş olan eksponansiyel ifadelerin uygulandığı plaketter olarak adlandırılır. Tek ve çift olarak ayrı olarak uygulanan eksponansiyel ifadelerin toplamı bölüşüm fonksiyonunu oluşturur. Şekil 2.1’de 6 adet spinden oluşan Trotter sayısı 5 olan kare örgüde, $|\varphi^i\rangle$ hallerinin periyodik sınır koşullarına uyduğu kabul edilmiştir. Bu durum bölüşüm fonksiyonunun yoğunluk matrisinin köşegen elemanlarının bir toplamı olduğu gerçeğinden kaynaklı doğal bir sonuçtur (Denklem 2.11). Örgü noktasındaki her bir siyah nokta yukarı yönlü spini ve beyaz nokta ise aşağı yönlü spini temsil etmektedir. Mavi çizgiler aşağı yönlü spinleri; kırmızı çizgiler ise yukarı yönlü spinlerini birleştirmektedir. Bu çizgilere dünya çizgileri adı verilmektedir (Hirsch, Sugar, Scalapino, & Blankenbecler, 1982). Her taralı bölgeyi spin uzayında birbirine bağlayan bağlı sınır hamiltoniyenlerinin eksponansiyelinin temsil ettiği unutulmamalıdır. Şekil 2.1 deki iki boyutlu yapı, spinlerin ayrık adımlar ile ilk $|\varphi^0\rangle$ konfigürasyonundan $|\varphi^1\rangle$ ‘e ve son olarak $|\varphi^{2M-1}\rangle$ halinden geri $|\varphi^0\rangle$ ‘e ilerlediğini temsil eden uzay-zaman resmi. İlk ve son adımdaki konfigürasyonlar birbirine eşittir. Bu ilüstrasyon “satranç tahtası dekompozisyonu” olarak ta bilinir (Barma & Shastry, 1978).

Taralı bölgede yani plaketterde spin çiftlerine etkiyen $e^{-\Delta\tau \hat{H}_i}$ bir konfigürasyonun istatistik ağırlığını hesaplarken tüm taralı bölgelerdeki bu eksponansiyellerin matris elemanlarını çarpılmasında kullanılmaktadır. Her $e^{-\Delta\tau \hat{H}_i}$ aslında i , $i+1$ noktalarında bulunan iki spinin bir zaman diliminden diğerine ilerlemesine temsil eden bir sanal

zaman evrimi operatörü gibi düşünebiliriz. Satranç tahtası dekompozisyonu ile her plakette $2^4 = 16$ olası spin konfigürasyonu bulunabilmektedir. Her konfigürasyon bir istatistiksel ağırlığı temsil etmektedir. Matris elemanlarının barındırdığı bu istatistiksel ağırlıklar ile aynı konfigürasyonların enerji değerleri kolayca hesaplanabilmektedir. Matris elemanlarının aldığı değerlerin “0” olması hali de o matris elemanının temsil ettiği istatistik ağırlığının bulunmaması ve böylece o konfigürasyonun oluşma durumunun olmaması anlamına gelmektedir. Bu durumlardaki konfigürasyonlar izinsiz ve diğerleri de izinli konfigürasyonlar olarak adlandırılmaktadır. $|\varphi^j\rangle = |\varphi_j\rangle$ ile $\{|\varphi^j\rangle\}$ hal kümesini t indisini alt indis biçiminde yazarsak, $\hat{S}_i^z$ ’nin öz durumlarını sembolize etmek için üst indis olarak z’ yi rahatça kullanabiliriz.

$$|\varphi_t\rangle \equiv |S_{1,j}^z\rangle |S_{2,j}^z\rangle \dots |S_{N,j}^z\rangle \quad (2.14a)$$

$$\hat{S}_i^z |S_{i,j}^z\rangle = S_{i,j}^z |S_{i,j}^z\rangle \quad (2.14b)$$

Denklem 2.14a halini alırken Denklem 2.14b için $S_{i,j}^z$ öz fonksiyonunun ($|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$) öz durumları için daha öncede belirtilmiş değerler $S_{i,j}^z = \mp 1/2$ şeklinde olacaktır. Denklem 2.15 te tüm örgü noktalarındaki spinlerin yukarı yönlü spin olduğu bir konfigürasyon için istatistiksel ağırlığın nasıl hesaplandığı gösterilmiştir.

$$W(S_p) \equiv \langle \varphi_j | e^{-\Delta\tau \hat{H}_i} | \varphi_{j+1} \rangle \quad (2.15)$$

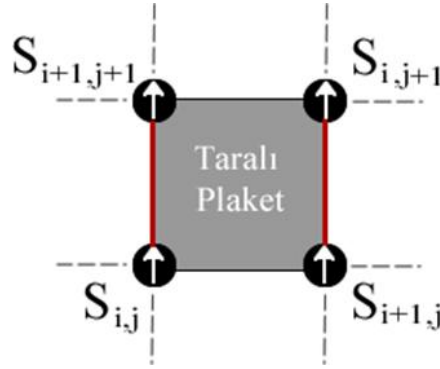
p dört klasik spinden oluşan plaketin konumlarını temsil etmektedir.

$$p = ((i, j), (i + 1, j), (i, j + 1), (i + 1, j + 1)) \quad (2.16)$$

S_p , lokal spin konfigürasyonu olarak Denklem 2.17 deki gibi tanımlanmıştır.

$$S_p \equiv (S_{i,j}^z, S_{i+1,j}^z, S_{i,j+1}^z, S_{i+1,j+1}^z) \quad (2.17)$$

Böylece $W(s_p) \equiv \langle S_{i,j}^z, S_{i+1,j}^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}_i} | S_{i,j+1}^z, S_{i+1,j+1}^z \rangle$ ifadesi ile istatistiksel ağırlık hesabı yapılarak 4×4 bir matris elde edilecektir. Bu matris istatistiksel ağırlıkları muhafaza eden yoğunluk matrisi olarak ta düşünülebilir. Şekil 2.20’deki örnekte $S_p \equiv (1,1,1,1)$ ve $W(s_p) \equiv \langle 11 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_i} | 11 \rangle$ dir.



Şekil 2.2. Taralı plaket örneği

Şekil 2.2’de kırmızı renkli kalın çizgiler, imajiner zaman doğrultusunda birbirini takip eden iki yukarı spinin dünya çizgisini temsil etmektedir.

$$Z \approx \sum_{S_{i,j}^z} \prod_p W(S_p) \quad (2.18)$$

$\sum_{S_{i,j}^z}$ iki boyutlu hale gelen örgü sistemindeki tüm $S_{i,j}^z$ spin konfigürasyonları üzerinden toplam ifade ederken, $\prod_p$ ise örgüdeki bütün taralı plaketlerin çarpımı olarak genişletilmiştir.

İmajiner zaman doğrultusunda periyodik sınır koşulları, bölüşüm fonksiyonu tanımından oluşmaktadır. Spin uzayı yani gerçek uzayda da periyodik sınır koşulları kullanılan Hamiltoniyen düzenlenerek oluşturulabilir. Şekil 2.2 ile görselleştirilen dünya çizgileri (kırmızı dikey çizgiler) konfigürasyonları kümesi sanal zaman boyunca periyodik sınır koşullarını sağlayarak klasik istatistik bir model tanımlamaktadır. Eğer belli bir dünya çizgisi konfigürasyonu C ’nin istatistiksel ağırlığı tüm taralı P plaketlerinin matris elemanlarının çarpımına eşit ise bahsi geçen klasik model kuantum bölüşüm fonksiyonu ile aynı bölüşüm fonksiyonuna sahiptir.

$$W(C) = \prod_P W_P(C|_P) \quad (2.19)$$

Denklem 2.18 de $W_P(C|_P)$, C konfigürasyondaki P plaketi için $e^{-\Delta\tau H_i}$ in matris elemanına tekabül etmektedir.

Tek boyutlu kuantum spin zinciri böylece iki boyutlu klasik model halini almıştır. Bölüşüm fonksiyonu $Z = \lim_{m \rightarrow \infty} Z^{(m)}$ olduğunu hatırlayalım. Buradaki m ifadesi fonksiyonun m . yaklaşıklığı olduğunu belirtir. Denklem 2.15 ve 2.18 ifadeleri yardımıyla 2 boyutlu spin-1/2 sisteminin bölüşüm fonksiyonu ile termodinamik nicelikler,

korelasyonlar ve lokalize dolaşıklık sınırları m. yaklaşıklık üzerinden hesaplanabilir.

2.1.2. Zassenhaus Yaklaşımı

Magnus çalışmalarından birinde Zassenhaus tarafından yayınlanmamış bir referanstan bahsetti. Baker–Campbell–Hausdorf formülünün ikizi olarak sayılabilecek bir formül ile ilgiliydi.(Magnus, 1954; Zassenhaus, 1939)

$$e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})} = e^{\lambda\hat{X}} e^{\lambda\hat{Y}} e^{\lambda^2\hat{C}_2} e^{\lambda^3\hat{C}_3} \dots \quad (2.20)$$

$\{C_n\}$ diğer bir yandan tekrarlı bir şekilde yazılarak (Suzuki, 1976a) genel C_n ifadesi elde edilir. (Denklem 2.22) (Suzuki, 1977)

$$\hat{C}_2 = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} (e^{-\lambda\hat{Y}} e^{-\lambda\hat{X}} e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})}) \right]_{\lambda=0} = -\frac{1}{2} [\hat{X}, \hat{Y}] \quad (2.21)$$

$$\hat{C}_3 = \frac{1}{3!} \left[\frac{\partial^3}{\partial \lambda^3} (e^{-\lambda^2\hat{C}_2} e^{-\lambda\hat{Y}} e^{-\lambda\hat{X}} e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})}) \right]_{\lambda=0} = \frac{1}{3} [\hat{C}_2, \hat{X} + 2\hat{Y}]$$

$$\hat{C}_n = \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial^n}{\partial \lambda^n} (e^{-\lambda^{n-1}\hat{C}_{n-1}} \dots e^{-\lambda^2\hat{C}_2} e^{-\lambda\hat{Y}} e^{-\lambda\hat{X}} e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})}) \right]_{\lambda=0} \quad (2.22)$$

Böylece $e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})}$ ifadesi Denklem 2.23'teki halini almaktadır.

$$e^{\hat{X}+\hat{Y}} = e^{\hat{X}} e^{\hat{Y}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{X},\hat{Y}]} e^{-\frac{1}{12}([\hat{X},[\hat{X},\hat{Y}]] - [\hat{Y},[\hat{X},\hat{Y}]])} \dots \quad (2.23)$$

Sonuç bölümünde bölüşüm fonksiyonunu $Z = Tr(e^{-\beta\hat{H}})$ hesaplamak için kullanılacak $\hat{O} = e^{-\beta\hat{H}}$ operatörü ile yoğunluk matrisini bulmak için kullanılacaktır.

2.1.3. Monte Carlo Yol İntegrali

Simülasyonlarda zamanın çoğunu integral hesaplamalar alır. Özellikle kuantum mekaniksel sistemlerde bu integraller çok boyutludur ve Monte Carlo yöntemi ile çok boyutlu integrasyonlar çok daha hızlı hesaplanabilir. Nümerik yöntemler genelde, integral alınacak bölgede seçilen noktalar ile elde edilen integrantın toplanmasını temel alır. Monte Carlo yönteminde rastgele sayıları üretilir ve bu sayılar kullanılarak integral yaklaşık olarak hesaplanır. Mesela N parçacıklı bir sistem için bazı integral hesaplamalar yapalım. Aslında M boyutlu uzayda N*M kadar integral hesaplamak gerekecektir. Her integrasyon için seçeceğimiz nokta sayısı L olduğunu farz edelim.

Tüm hesabın $L^{N \times M}$ adımıda biteceği gerçeği aniden belirlemektedir. Bu ise çok fazla işlem zamanına tekabül edecektir ki nokta sayısının 10 dan büyük seçilecek olduğunu düşünürsek önemli bir işlem zamanına denk gelecektir (Cancio & Chang, 1995). Geleneksel yöntemlere göre çok boyutlu integrallerde Monte Carlo yönteminin daha başarılı olduğunu belirtmiştik. Mesela tek boyutlu bir $f(x)$ fonksiyonu ele alalım.

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \quad (2.21)$$

I 'nin alacağı değer Şekil 2.3 ile verilen $f(x)$ fonksiyonunun $[a,b]$ aralığının altında kalan alandır. $[a,b]$ aralığında aynı alandaki dikdörtgenlerin alanlarını toplayarak S alanı bulunabilir. Bu aralığın N nokta ile $N+1$ adet dikdörtgene bölünmesi halinde I ifadesi aşağıdaki hali alır.

$$I \approx \sum_{i=1}^N f(x_i) \Delta x_i \quad (2.22)$$

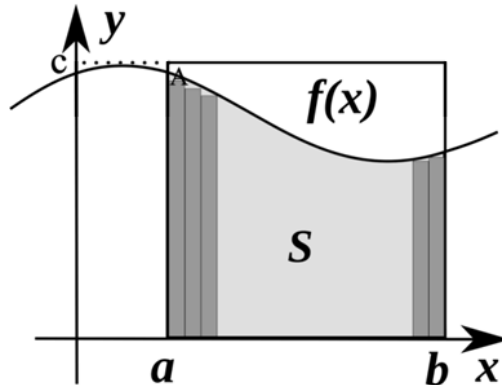
Simpson yaklaşımında $f(x)$ ' in $[x_i, x_{i+1}]$ aralığındaki kısmına ikinci dereceden polinomlar vasıtasıyla yaklaşılır.

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{(N-1)/2} \int_{x_{2i-1}}^{x_{2i+1}} f(x)dx \quad (2.23)$$

$$I = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\Delta x_i}{3} [f(x_{2i-1}) + 4f(x_{2i}) + f(x_{2i+1})]$$

Simpson yöntemi ile yapılan integral alma işleminde hata $N^{-4/M}$ ile ölçeklidir. Burada N ; seçilen nokta sayısını ve M ise boyutu ifade eder. İntegrasyon boyutu arttıkça, seçilen nokta sayısı ile hatanın azalış hızı azalmaktadır.

Deterministik olmayan yanıyla Monte Carlo yöntemi, Şekil 2.3' de gösterildiği gibi $[a, b]$ aralığında belli bir alan içerisinde $(c \cdot (b-a))$ olan $f(x)$ fonksiyonunun önceden belirlenmiş N adet nokta sayısı ile integrasyon aralığı belirlenerek uygulanır.



Şekil 2.3. S, x=a ve x=b aralığında y=f(x) eğrisinin altında kalan alan olmak üzere yol integrali grafiği

N sayıdan N_1 tanesi A; N_2 tanesi S bölgesinde ise S bölgesinin alanından I yaklaşık,

$$I \approx \frac{N_2}{N} c(b - a) \quad (2.24)$$

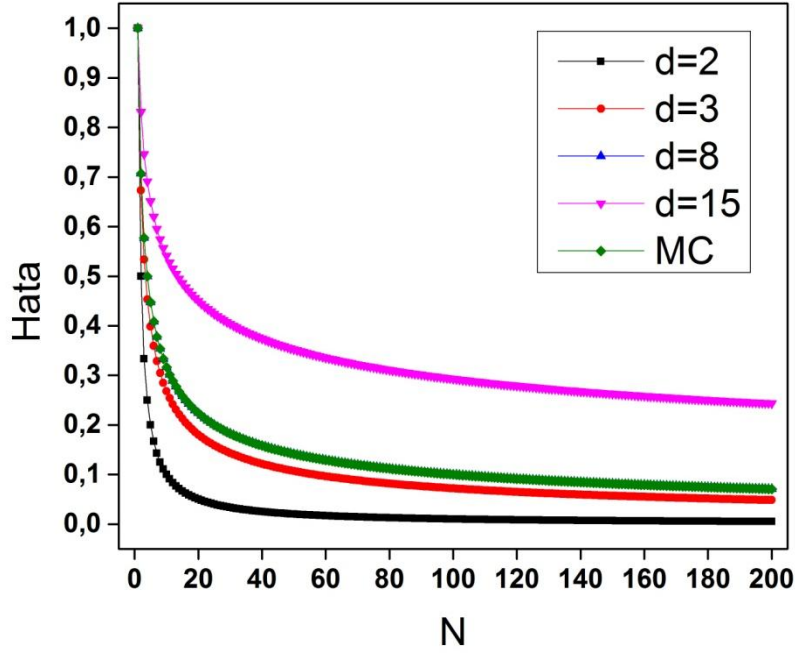
olarak hesaplanır. Ortalama değer ile integrasyon için ise f fonksiyonunun belirtilen aralıktaki ortalaması gelişigüzel N adet nokta ile

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (2.25)$$

olarak hesaplanır. Ayrıca $\langle f^2 \rangle$ ifadesi Denklem 2.26'daki gibi olacaktır.

$$\langle f^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^2(x_i) \quad (2.26)$$

Monte Carlo Yöntemiyle alınan integralde ise hata $1/\sqrt{N}$ ile ölçeklidir. Monte Carlo integrasyonunda ise hata boyuta bağlı olmadığı için çok boyutlu integrasyon yapılacağı durumlarda farkını ortaya koymaktadır. Şekil 2.4' te N adet nokta için, Simpson Kuralı ile alınan 2, 3, 8 ve 15 boyutlu integraller için hata payları ile MC metodu kullanılarak alınan integrallerin hata payı karşılaştırılmıştır. Yeşil dörtgen ile gösterilen Monte Carlo yöntemine ait eğri ile mavi üçgen (d=8) üst üste gelmektedir. M=8 için hata payı MC ile aynıdır. 8 den büyük değerler için Simpson kuralı kullanışsızdır. Yani hata payı MC metoduna göre daha fazladır.



Şekil 2.4. Monte Carlo yöntemi (MC) ile Simpson yöntemi ile hesaplanan d boyutlu integrallerin hata payının karşılaştırılması

2.1.4. Önem Örnekleme ve Metropolis Algoritması

Bir önceki bölümde bahsedilmiş integrasyonu icra ederken bazı fonksiyonlar çok az katkı sağlar (neredeyse sıfır). Bu noktaları daha düşük ağırlıkla hesaplarken daha büyük katkılar veren noktalar üzerinden integrali almak zamansal kazanım sunacaktır. Böylece integrasyonu tanımlayan olasılık dağılım fonksiyonuna ihtiyaç ortaya çıkmıştır. Önem örneklemeinde $g(x)$ olasılık dağılım fonksiyonu olarak ele alınırsa,

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} g(x)dx \quad (2.27)$$

biçiminde yazılır ve ifadenin $f(x)/g(x)$ 'in ortalaması olduğu aşikar olmaktadır. Böylece $g(x)$ 'e uygun dağılmış noktalar kullanılarak alınan integral ortalama integrale iyi bir yaklaşımdır.

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \quad (2.28)$$

Metropolis yöntemi (Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller, & Teller, 1953) mevcut durumdan bir sonraki duruma geçiş için sistemin bu ilk ve son hallerinin enerji

farklarına bağılı bir geçiş olasılığı kullanır. Bu durumların sıralı yapısı Monte Carlo zamanı ile oluşturulur ve deterministik değildir. Ising modeli gibi stokastik modellerde (Joyce, 1972) zamana bağılı bu davranış bir ana denklem ile tanımlanır.

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = -\sum_{n \neq m} [P_n(t)W_{n \rightarrow m} - P_m(t)W_{m \rightarrow n}] \quad (2.29)$$

Burada $P_n(t)$, sistemin t anında n durumunda bulunma olasılığı iken; $W_{n \rightarrow m}$, n halinden m haline geçiş olasılığıdır. Denge durumunda $\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = 0$ 'dır. Böylece eşitliğin sağ tarafındaki iki terim birbirine eşit olmak zorundadır.

$$P_n(t)W_{n \rightarrow m} = P_m(t)W_{m \rightarrow n} \quad (2.30)$$

Buna detaylı denge durumu (detailed balance) denir. n. halin oluşma olasılığı ise Z bölüşüm fonksiyonu; k_B , Boltzmann sabiti ve T sıcaklık olmak üzere

$$P_n(t) = \frac{e^{-\frac{E_n}{k_B T}}}{Z} \quad (2.31)$$

Paydadaki Z zorluk çıkaran bir ifadedir. Bu zorluğu yenmek için Markov zinciri oluşturulabilir: Her yeni durumu direkt bir önceki durumdan oluşturmak. Eğer n.nci durumdan bir m.nci durum oluşturursak paydadaki Z ortadan kalkar ve görelî olasılık her halin kendi olasılığının bölümü halini alır. Sonuç olarak iki durum arasındaki enerji farkı,

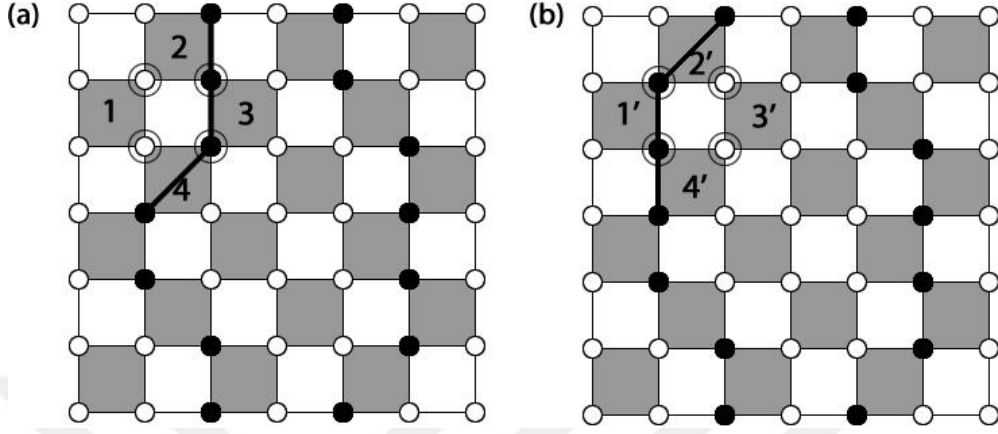
$$\Delta E = E_n - E_m \quad (2.32)$$

Detaylı denge durumuna uyacak herhangi bir geçiş olasılığı kabul edilebilir. İstatistik fizikte ilk kullanılan seçim olasılığı Metropolis formudur (Metropolis ve ark., 1953).

2.2. Spin Yönelimi Değişirme Yöntemleri

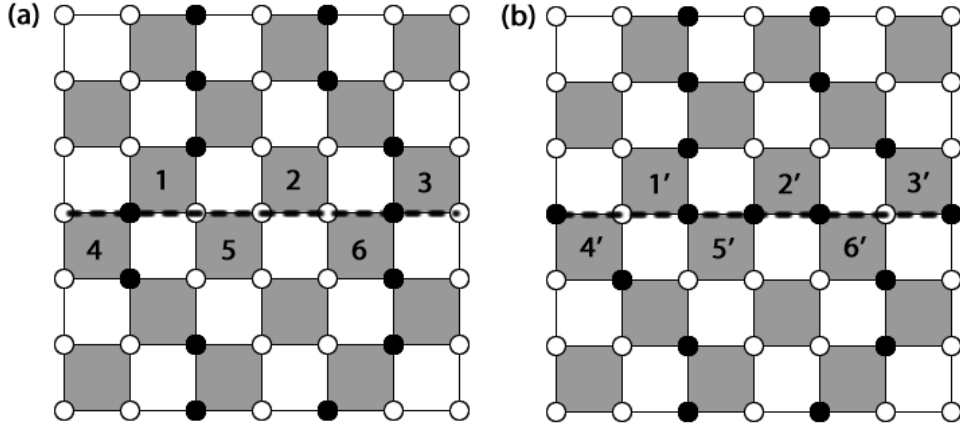
Spinlerin yönelimleri, lokal ve/veya lokal olmayan (non-local veya global) şekilde değiştirilir. Lokal olan durum Şekil 2.5 ile örneklenmiştir. Şekil 2.5(a) spinlerin ilk durumu, Şekil 2.5(b) spin yönelimleri değiştikten sonraki durumu göstermektedir. Lokal değişiklikler net mıknatıslanmayı değiştirmemektedir. Bunun nedeni örgüde hali hazırda var olan spinlerin sadece yerlerinin değiştirilmiş olmasıdır. Bu yüzden lokal olmayan

değişiklikler önem taşımaktadır. Lokal değişiklikler dünya çizgilerinin sayısı ve global özellikleri değiştirmedeği için global olanlara ihtiyaç duyulmuştur. Periyodik sınır koşulları her iki ekseninde de uygulanmaktadır.

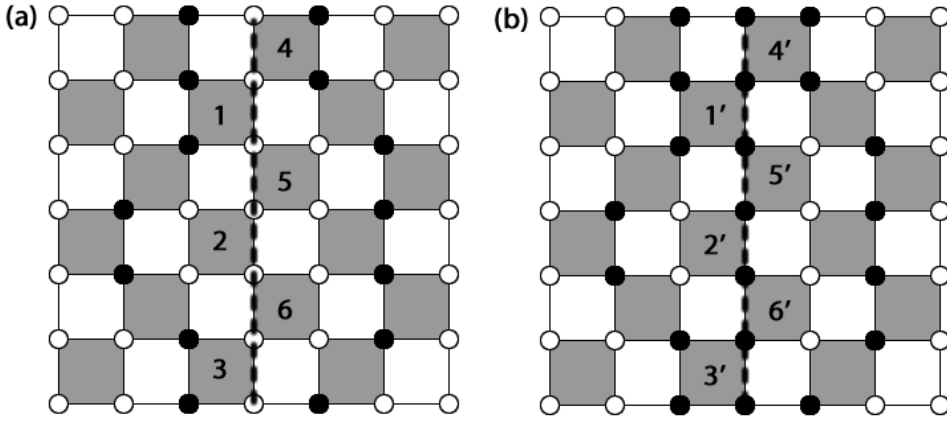


Şekil 2.5. Seçilen örgüdeki spinin bulunduğu taralı olmayan plakete lokal olarak spin yönelimi değişimi (a) uygulanmamış durum (b) uygulanmış durum

Global spin yönelimi değişikliklerine örnek olarak imajiner uzay tipi (Şekil 2.6) veya gerçek uzay tipi (Şekil 2.7) yönelim değişiklikleri verilebilir. İlk tipin uygulanması için herhangi bir imajiner zamandaki spinlerin hepsi seçilir ve bu spinlerin hepsi ters çevrilir. İkinci tip için gerçek uzayda rastgele seçilen parçacığa denk gelen imajiner uzaydaki tüm spinler ters çevrilir fakat bu şekilde oluşturulan yeni hallerin kabulü zordur. Her spin bir dörtlü spin yapsına dahil olduğu için değişiklik yapıldıktan sonra izinsiz haller oluşabilir. Kritik yavaşlama problemi parçacık sayısı ve mıknatıslanmanın korunumu yani dünya çizgileri sayısının korunumu ve ayrıca grand-kanonik topluluğun örneklenememesi, lokal spin yönelimi değişimlerinin bir sorunudur. Ayrıca ikinci seviye faz geçişlerinde kritik yavaşlama problemi de mevcuttur. Bu sorun ‘loop algoritması’ ile çözülmüştür. Ayrıca kuantum Monte Carlo simülasyonlarında bir diğer problem de negatif işaret problemidir.



Şekil 2.6. Kesikli çizgi seçilen Trotter sayısını belirtirken, taralı plaketteki sayılar spin yönelimi değişimi (a) öncesinde verteks ağırlıkları (b) sonrasında oluşan yeni hallerin verteks ağırlıklarını belirtmektedir



Şekil 2.7. Kesikli çizgi seçilen gerçek uzay noktasını belirtirken, taralı plaketteki sayılar spin yönelimi değişimi (a) öncesinde verteks ağırlıkları (b) sonrasında oluşan yeni hallerin verteks ağırlıklarını belirtmektedir.

2.3. Negatif İşaret Problemi

Kuantum sistemlerin Monte Carlo simülasyonunda özellikle fermiyonik modellerde negatif işaret problemi sıkça karşılaşılmaktadır. Bu KMC simülasyonların ana ve en önemli problemlerinden biridir (Loh Jr ve ark., 1990). Ağırlıkların negatif olması, sistemin evrilmesi sırasında karar mekanizmasını kökten etkilemekte ve modelin çalışmaz hale gelmesini sağlamaktadır. İzinli kuantum Monte Carlo dünya çizgisi konfigürasyonlarının tamamen negatif olması halini düşünün. Bu konfigürasyonlar için negatif bir olasılık değeri atanamaz çünkü olasılık değerleri pozitif olmalıdır. Bu

durumun sorun teşkil etmeyeceğini ilk etapta basit bir akıl yürütme ile düşünebiliriz. Diyebiliriz ki bir spin zincirinde veya kare örgüde yani her hangi iki parçalı örgü graf yapısında izinli kuantum Monte Carlo konfigürasyonundaki spin değiş tokuş plaketlerinin toplam sayısı çift olacaktır. Bunun sonucunda konfigürasyonların ağırlıkları toplamı pozitif kalacaktır. (Heisenberg Antiferromanyet için tüm ağırlıklar pozitif olacağı için dünya çizgisi konfigürasyonlarının Monte Carlo örnekleme metodu uygulanabilir) Örgü iki parçalı değilse durum değişir. Üçgen tek örgüyü göz önüne alalım. (Köşelerde 3 adet spin-1/2 parçacığın oluşturduğu graf) Sağ köşedeki spinden başlayarak saat yönünde lokal spin konfigürasyonlarını değiştirerek ilk konfigürasyona ulaştığımızı farz edelim. Böylece tek sayıda spin değiş tokuşu uygulamış olmaktadır. Üçgen örgüde (iki parçalı olmayan örgü) $W(S)$ ağırlıkları artık pozitif olmak zorunda değildir; negatif değerler de alabilir. Bu durumda “Bu tip konfigürasyonlar için nasıl Monte Carlo benzeştirimi yapılabilir?” sorusu sorulabilir.

$$Z = \sum_S W(S) = \sum_S |W(S)| \cdot \text{Sgn}(S) \quad (2.40)$$

Denklem 2.40 ile verteks ağırlığı, mutlak değeri ve işaretinin çarpımı şeklinde ifade edildi.

$$\text{Sgn}(S) = \frac{W(S)}{|W(S)|} = \pm 1 \quad (2.41)$$

Şimdi antiferromanyetik bir sistemi simüle ettiğimizi farz edelim ve işareti görmezden geelim. Aslında bu kesinlikle ferromanyetik Heisenberg modelini aynı örgüde Denklem 2.42 deki bölüşüm fonksiyonu ile simüle etmek demektir.

$$Z_F = \sum_S |W(S)| \quad (2.42)$$

Antiferromanyetik modelde bir A gözlenebilirinin beklenen değeri denklem 2.43 ile verildiği gibi elde ederiz.

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_S W(S) A(S) \\ \langle A \rangle &= \frac{1}{Z} \frac{Z_F}{Z_F} \sum_S |W(S)| \cdot \text{Sgn}(S) \cdot A(S) \\ \langle A \rangle &= \frac{Z_F}{Z} \frac{1}{Z_F} \underbrace{\sum_S |W(S)| \cdot \text{Sgn}(S) \cdot A(S)}_{\langle \text{Sgn} \cdot A \rangle_F} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Ferromanyetik modeldeki simülasyonda $\langle Sgn.A \rangle_F$ ’nın beklenen değeri ve işaretin kendisinin beklenen değerinden A gözlenebilirinin beklenen değeri bulunabilir.

$$\frac{Z}{Z_F} = \langle Sgn \rangle_F \quad (2.44)$$

$$\langle A \rangle = \frac{\langle Sgn.A \rangle_F}{\langle Sgn \rangle_F} \quad (2.45)$$

Şu andan itibaren antiferromanyetik modelde A beklenen değerinin elde edilmesi için sadece ferromanyetik modeli simüle edilmesi ve $\langle Sgn.A \rangle_F$ ile $\langle Sgn \rangle_F$ ölçümünün yapılması yeterli olacaktır.

2.4. Loop Algoritması

Bir Kuantum Monte Carlo prosedürü olarak ilk kez “Lattice 91”’de (Tsukuba, Japonya) geliştirilen Loop algoritması (Evertz, Lana, & Marcu, 1993; Evertz & Marcu, 1993; Kawashima, Gubernatis, & Evertz, 1994), geleneksel dünya çizgileri algoritmalarının neredeyse tüm zorluklarını, dünya çizgileri konfigürasyonunda lokal stokastik kararlarla belirlenmiş lokal olmayan değişiklikler yaparak aşmaktadır. Stokastik seri açılımı (SSE) (A W Sandvik, 1992; Anders W Sandvik, 1997; Anders W Sandvik & Kurkijärvi, 1991) ve imajiner zaman dünya çizgileri formülasyonunu da (Scalettar, 1998) kapsayan sayısız modele uygulanabilmektedir. Klasik istatistiksel sistemde Swendsen-Wang’ın geliştirdiği küme algoritmaları (Swendsen & Wang, 1987) ile ilişkilidir. Kümeler “loop” şeklinde olduğu için bu adı almaktadır. Başlıca özellikleri; otokorelasyonların indirgenmiş olması, sürekli zaman (Trotter yaklaşımını tamamen elimine ederek) Monte Carlo için kolayca formüle edilebilirliği, gelişmiş değerlendiricilerle (Improved Estimators) ölçülen niceliklerin hatalarının indirgenerek gözlenebilirlerin loop-özellikleri cinsinden formüle edilebilmesi, köşegen olmayan operatörlerin gelişmiş değerlendiricilerle ölçülebilmesi ve işaret probleminin üstesinden gelebilmesi (özellikle fermiyonik sistemlerde) olarak sıralanabilir. Ayrıca geleneksel dünya çizgilerine oranla algoritma daha kolay programlanabilir.

Küme algoritmalarında yeni G_p değişkenleri tanımlanmıştır. $W_p(S_p, G_p) \geq 0$ olmak üzere G_p , plakette tanımlanmış bir graf değişkenidir. Şekil 2.10 da graf örnekleri gösterilmiştir. $G_p=1$, $G_p=2$ ve $G_p=3$ graf değişkeni, bağlantı kurduğu köşe spinlerinin

herhangi ikisinin yöneliminin değişeceği anlamına gelmektedir. $G_p=4$ ise plaketteki tüm spinlerin hepsinin yöneliminin değişeceğini belirtir. Bu spin yönelim değişimleri bilgisini elinde tutan graf değişkenleri oluşacak yeni 4'lü spin durumunun izinli olup olmadığı bilgisini $\Delta(S_p, G_p)$ vasıtasıyla vermiş olurlar.

$$W_p(S_p) = \sum_{G_p} W_p(S_p, G_p) \quad (2.46)$$

Bu durumda bölüşüm fonksiyonu Z , Denklem 2.18 ve Denklem 2.46 yardımıyla Denklem 2.47 şeklinde ifade edilir.

$$Z = \sum_S \prod_p W(S_p) = \sum_{S, G} \prod_p W_p(S_p, G_p) \quad (2.47)$$

$\sum_G$ toplamı, bölüşüm fonksiyonunu graf değişkenlerinin tüm konfigürasyonları üzerinden genişletmektedir. Bir plaketin N bileşeni var ise plaketteki kırılmaların (breakup) sayısı $N_b(N)$ Denklem 2.48 ve Denklem 2.49'daki gibi tanımlanır.

$$N_b(N) = \sum_k^N g(N, k) \quad (2.48)$$

$$\sum_{i=1}^k P_i g(N, i) = k^N \quad (k = 1, 2, \dots, N) \quad (2.49)$$

Herhangi bir kırılma parçasında spinler benzer şekilde değiştirilirse, tek bir konfigürasyondan birçok tip spin konfigürasyonu elde edilir. Graf değişkeni G_p 'nin değeri böyle bir spin konfigürasyonu grubunu tanımlar. G_p durumlarının sayısı $O(\alpha^N)$ gibi hızlıca artar. Fakat Monte Carlo simülasyonunda durumların sayısı az olduğu için çok önem arz etmemektedir. Fortuin (C M Fortuin, 1969) ve Kasteleyn'e göre (Cornelius Marius Fortuin & Kasteleyn, 1972) $W(S_p, G_p)$, Denklem 2.50'deki gibi tekrar yazılabilir. $v_p(G_p)$, G_p grafının graf ağırlığı olarak adlandırılır ve Denklem 2.50 kullanılarak hesaplanır.

$$W_p(S_p, G_p) = v_p(G_p) \Delta(S_p, G_p) \quad (2.50)$$

$$\Delta(S_p, G_p) = \begin{cases} 1, & S_p \in G_p \\ 0, & \text{diğer durumlar} \end{cases} \quad (2.51)$$

Geleneksel Monte Carlo algoritması ile üretilmiş bir Markov süreci spin konfigürasyon uzayında $S^{(1)} \rightarrow S^{(2)} \rightarrow S^{(3)} \rightarrow \dots$ şeklindedir. Bir küme algoritmasının Markov süreci

ise spin ve graf konfigürasyonları uzaylarında birbirini izleyerek $S^{(1)} \rightarrow G^{(1)} \rightarrow S^{(2)} \rightarrow G^{(2)} \rightarrow S^{(3)} \rightarrow G^{(3)} \rightarrow \dots$ devam eder. Spin ve graf konfigürasyonları arasındaki geçiş olasılıkları Denklem 2.52 ve Denklem 2.53'te tanımlanmıştır.

$$P(S \rightarrow G) \equiv \frac{\prod_p W_p(S_p, G_p)}{\sum_{G'} \prod_p W_p(S_p, G'_p)} \quad (2.52)$$

$$P(G \rightarrow S) \equiv \frac{\prod_p W_p(S_p, G_p)}{\sum_{S'} \prod_p W_p(S'_p, G_p)} \quad (2.53)$$

$S \equiv \cup_p S_p$ ve $G \equiv \cup_p G_p$, sırasıyla global spin ve graf konfigürasyonlarıdır. Bir plaketteki her lokal geçiş Denklem 2.54 ile belirlenir.

$$P(S_p \rightarrow G_p) \equiv \frac{W_p(S_p, G_p)}{\sum_{G'_p} W_p(S_p, G'_p)} \quad (2.54)$$

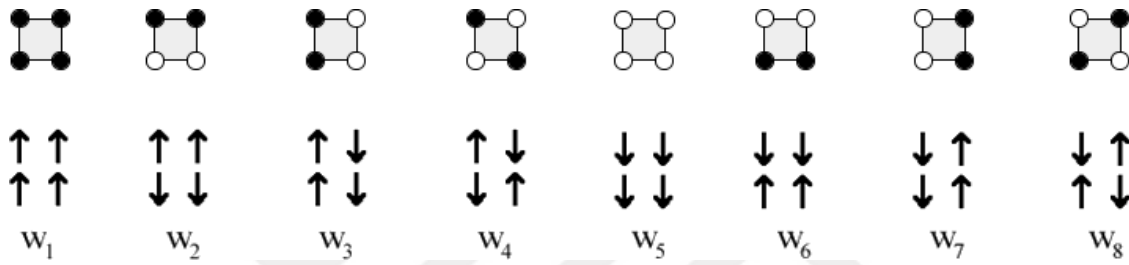
Yukarıda verilen geçiş olasılıkları detaylı denge durumunu sağlamaktadır. Markov zincirinde herhangi bir S spin konfigürasyonunun ve G graf konfigürasyonunun olasılığı sırasıyla Denklem 2.55 ve Denklem 2.56 ile tanımlanmıştır.

$$P(S) = \frac{1}{Z} \sum_G \sum_P W_p(S_p, G_p) = \frac{1}{Z} \prod_p W_p(S_p) \quad (2.55)$$

$$P(G) = \frac{1}{Z} \sum_S \sum_P W_p(S_p, G_p) \quad (2.56)$$

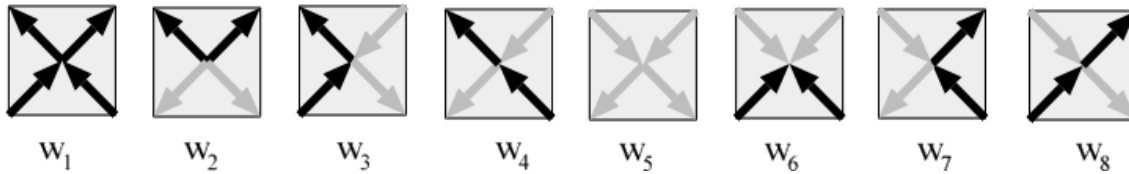
G global graf konfigürasyonları spinlerin sistem içerisinde sadece nasıl bölündüğünü belirttiği için, bir spin konfigürasyonu farklı konfigürasyonlar arasından Denklem 2.53 ile göre belirlenebilir. Bu spin konfigürasyonları arasında global farklılıklar vardır. Monte Carlo sürecinde lokal olmayan böyle bir spin yönelimi değişimi, Denklem 2.54 ile verilen her plaketteki her lokal stokastik karar ile çıkarılmış olur. Sistemdeki kümelerde bulunan spinleri aynı anda güncelleştiren algoritma ise küme algoritması (cluster algorithm) olarak adlandırılır. Küme algoritması geleneksel lokal spin yönelimi değişimi algoritmalarına göre önemli avantajlara sahiptir. İkili spin korelasyon fonksiyonu bu ikili örgü noktalarını aynı kümeye ait olduğunu söyleyen olasılık fonksiyonunu ile özdeşdir. Böylece küme algoritması başarılı Monte Carlo konfigürasyonları arasındaki otokorelasyon zamanını oldukça azaltır. Ayrıca loop

algoritmaları büyük sistemler ve düşük sıcaklıklarda KMC simülasyonlarına olanak sağlar. Kuantum modellerde ergodikliği sağlamak için dünya çizgileri algoritması yapay global spin yönelimi değişimine ihtiyaç duyar. Küme algoritmasında sadece doğal global spin yönelim değişimi mevcuttur. Kümeler (loop) çevrim şeklinde olduğundan dolayı bu küme algoritması Denklem 2.57 ile verilen korunum kuralı doğrultusunda loop algoritması olarak adlandırılır. Loop algoritması hem ayrık imajiner zamanda hem de sürekli imajiner zamanda uygulanabilir. 8 adet olası 4'lü spin konfigürasyonları Şekil 2.8'de, Şekil 2.9'da bu konfigürasyonların verteks okları ile temsili ve Şekil 2.10 ile de plaket kırılmaları (breakup) örnek olarak gösterilmiştir.

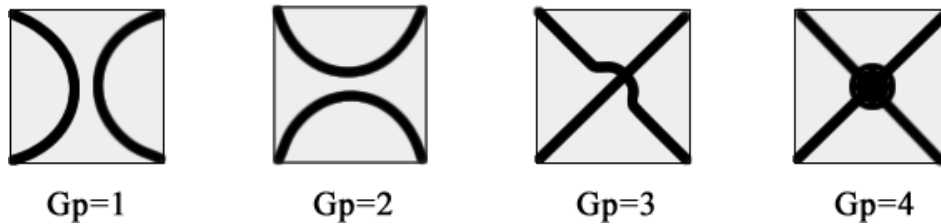


Şekil 2.8. Sekiz olası 4'lü spin-1/2 durumları ve verteks ağırlıkları (W_i): üstteki sıra siyah noktalar yukarı yönlü beyaz noktalar ise aşağı yönlü spinleri temsil etmektedir

Şekil 2.9'da aşağı ve yukarı yönlü spinlerin, verteks okları ile temsili gösterilmektedir. Siyah renkli verteks okları yukarı yönlü spinleri, gri renkli oklar ise aşağı yönlü spinleri takip etmektedir. Şekil 2.8'de plaketin köşesinde bulunan spin yönelimlerinin verteks okları Şekil 2.9'da belirtilmiştir.

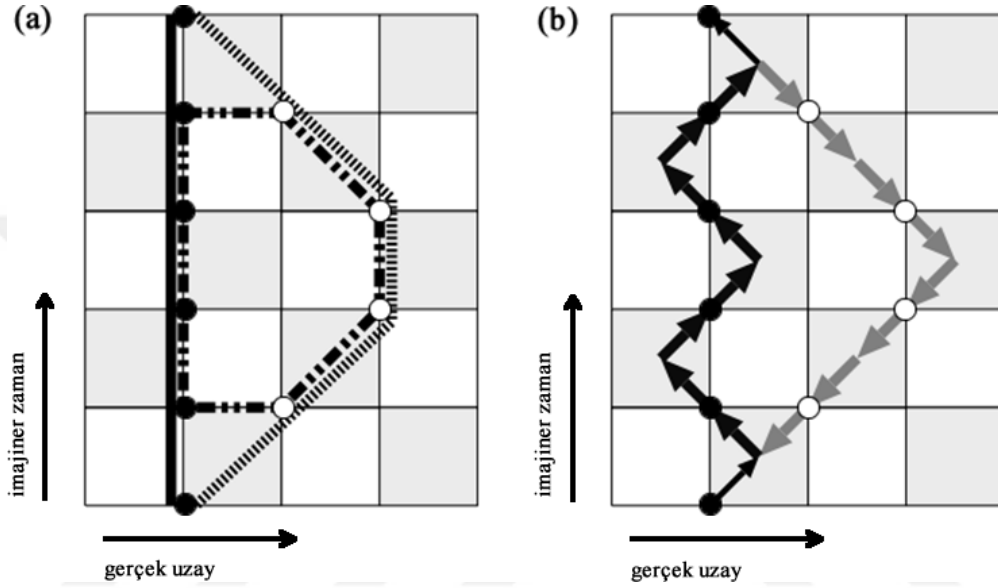


Şekil 2.9. olası 4'lü spin-1/2 durumlarının verteks okları gösterimi



Şekil 2.10. 4'li spin-1/2 durumlarının plaket kırılmaları

Şekil 2.10 da $G_p=4$ kırılması 4 spini birden dondurduğu için, donmuş kırılma olarak adlandırılır. Diğer kırılmalar plaketi iki parçaya bölmektedir. Donmuş kırılmalar diğerlerine göre daha geniş kümeler oluşturulmasına vesile olurlar. Unutulmaması gereken bir nokta verimli bir simülasyon için kümelerin küçük olmasının uygun olacağıdır. Böylece donmuş kırılmalara geçiş olasılığı da daha küçük bir değerde olacaktır.



Şekil 2.11. Loop algoritması ile bir güncelleme örneğinin (a) dünya çizgileri ile gösterimi (b) verteks okları ile gösterimi

Şekil 2.11(a) da kullanılmış olan kalın düz çizgi tek bir dünya çizgisidir. Noktalı kesikli çizgi olası bir çevrimi temsil etmektedir. Çevrim boyunca spinler ters çevrilince kesikli dünya çizgisi oluşmaktadır. Buradaki çevrim lokal olacak kadar küçük değildir. Şekil 2.11(b)'de aynı durumun verteks okları ile temsili gösterilmektedir. Çevrim kalın oklarla temsil edilmektedir. Verteks gösterimde her çevrim spin konfigürasyonunun oklarını takip etmektedir. Yani çevrim, zaman yönünde yukarı yönlü spinler ile dünya çizgisi oluşturmaktadır. Aşağı yönlü oklar dünya çizgisi oluşturmaz. Loop algoritmasının bir Monte Carlo güncellemesinin en temel prosedürü iki stokastik haritalamadan oluşmaktadır: Spinlerden spinler artı çevrimlere oradan da yeni spinlere.

Çevrimin izleyeceği yön belirlenir. Seçilen plakette bulunan spinlerin konfigürasyonuna ait geçiş olasılığı ile her taralı (gri) plaket için bir kırılma (breakup) seçilir. Bu kırılmalar oluşturulacak kümeler kurulur.

Kümeye çevrim doğrultusunda tüm okların yönleri değiştirildiğinde her küme uygun olasılıkla tersinmiş olur. Böylece yeni spin konfigürasyonları oluşmuş olur. Olasılıkların değeri, Hamiltoniyene ve önceki spin konfigürasyonlarına bağlıdır.

Sürekli imajiner zamanda $\Delta\tau \rightarrow 0$ ($\frac{\beta}{M} \rightarrow 0$) olduğu için dünya çizgileri Trotter doğrultusu boyunca her yerde sürekli ve bazen komşu örgü noktasına atlayabilir. Bu atlamalar anlık olduğundan, dünya çizgileri konfigürasyonu, dünya çizgilerinin atladığı imajiner zamanı tayin ederek tanımlanır. İmajiner zaman aralıklarının sonsuz küçük olduğu durum için $\hat{H}_i$, G_p graf değişkenleri ile doğrudan temsil edilebilir.

$$\langle \varphi_j | \hat{H}_i | \varphi_{j+1} \rangle \equiv - \sum_{G_p} a_p(G_p) \Delta(S_p, G_p) - B_p(S_p) \quad (2.57)$$

$\Delta(S_p, G_p)$, ayırık imajiner zamanda açıklandığı gibidir. Denklem 2.15'te belirtilen $W_p(S_p)$ verteks ağırlıkları sürekli imajiner zamanda $\epsilon \equiv \Delta\tau \ll 1$ için Denklem 2.58'deki halini alır.

$$W_p(S_p) \equiv \langle \varphi_j | e^{-\Delta\tau \hat{H}_i} | \varphi_{j+1} \rangle \approx e^{-\epsilon B_p(S_p)} \left[I_p(S_p) + \epsilon \sum_{G_p} a_p(G_p) \Delta(S_p, G_p) \right] \quad (2.58)$$

$I_p(S_p)$, bir plaketteki birim operatördür. Kolaylık olması açısından $\Delta(S_p, 1) \equiv I_p(S_p)$ olarak alınmıştır. İnfinitesimal imajiner zaman aralığının limiti alındığında ($\epsilon \rightarrow 0$), bir plaketteki geçiş olasılığı (Denklem 2.54) şu şekilde indirgenebilir:

- i. Eğer mevcut S_p hali $G_p = 1$ grafi ile uyumlu ise, mesela $(t, t + \epsilon)$ zaman aralığında spinlerde takas durumu mevcut değilse,

$$P(S_p \rightarrow G_p) = \epsilon a_p(G_p) \Delta(S_p, G_p) \quad (G_p = 1) \quad (2.59)$$

$$P(S_p \rightarrow 1) = 1 - \sum_{G_p' \neq 1} P(S_p \rightarrow G_p')$$

- ii. Mevcut S_p hali $G_p=1$ grafi ile uyumsuz olduğu durumda, mesela t zamanındaki hal $t + \epsilon$ zamanındaki halden farklı ise,

$$P(S_p \rightarrow G_p) = \frac{a_p(G_p) \Delta(S_p, G_p)}{\sum_{G_p' \neq 1} a_p(G_p') \Delta(S_p, G_p')} \quad (G_p = 1) \quad (2.60)$$

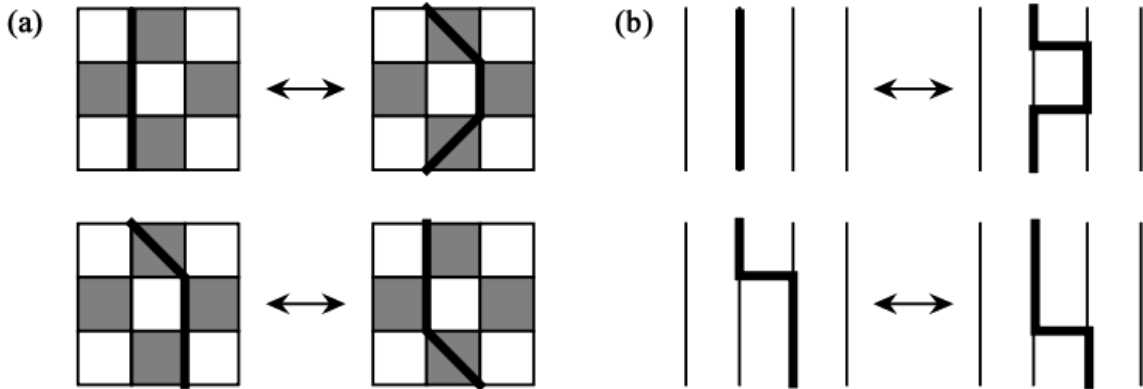
$$P(S_p \rightarrow 1) = 0$$

Trotter yönünde devam eden dünya çizgilerindeki plaketlere için Denklem 2.59 uygulanmaktadır. ϵ imajiner zaman aralığında $G_p \neq 1$ olan bir graf seçmenin olasılığı ise $\epsilon a_p(G_p) \Delta(S_p, G_p)$ ile belirlenmektedir. Bunun anlamı süreklilik limitinde G_p graflarının düzgün bir aralık üzerinden $a_p(G_p) \Delta(S_p, G_p)$ gibi bir olasılık yoğunluğu ile dağıtılmasıdır. Diğer taraftan Denklem 2.60, iki komşu dünya çizgisinin takas olduğu veya lokal bir halin değiştiği zaman noktasına bağlı graf ile olasılık ifadesini belirtir. Buradaki ifade olasılık yoğunluğu değildir.

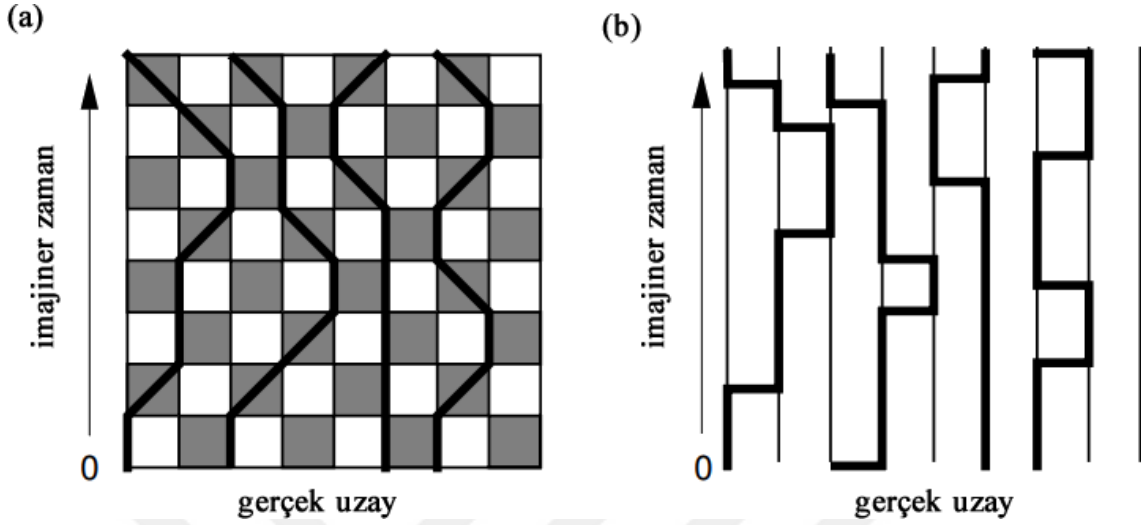
Sürekli imajiner zamanda loop algoritması genel olarak şu şekilde özetlenebilir. Her komşu dünya çizgisi çifti için,

- i. $G_p (\neq 1)$ olan graflar, Denklem 2.59'daki gibi her imajiner zaman aralığı üzerinden dünya çizgileri kesilmeyecek biçimde dağıtılır.
- ii. İki örgü noktası arasında hallerin takas edilebildiği her zaman noktasında Denklem 2.60 ile bir G_p grafi seçilir.
- iii. Diğer yerlere graf $G_p = 1$ atanır.

Sonra kümeler değiştirilerek spin değerleri güncelleştirilir. (Denklem 2.53) Bu algoritma ayrık imajiner zamandaki loop algoritmasına göre bazı avantajlara sahiptir. Bunlardan en önemlisi Suzuki-Trotter dekompozisyonunda sonlu Trotter sayısı m 'den kaynaklanan sistematik hatayı indirmek için Trotter ekstrapolasyonu yapma gereksiniminin süreklilik limitinde ortadan kalkmasıdır. Böylece düşük sıcaklıklarda KMC simülasyonları da daha elverişli hale gelmektedir. Ayrık imajiner zamandakine göre bazen daha kolay bilgisayara uygulanabilir (Evertz ve ark., 1993). Sürekli imajiner zamandaki 2 boyutlu klasik örgü Şekil 2.12 ve Şekil 2.13 ile gösterilmiştir.

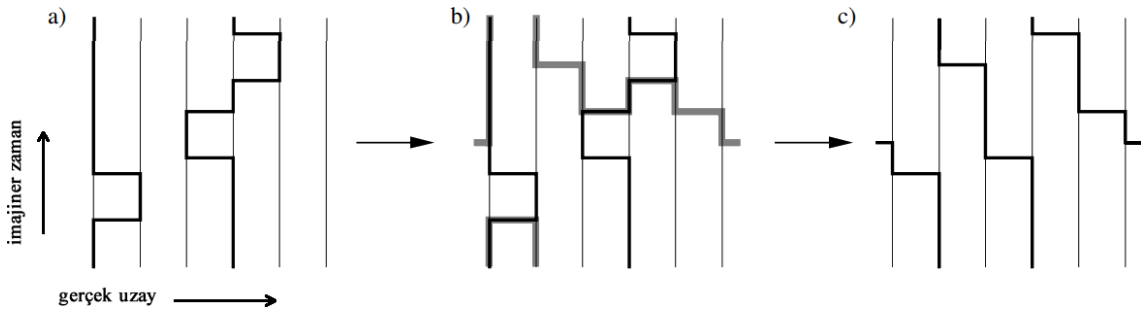


Şekil 2.12. İki dünya çizgisinin lokal olarak değiştirilmesi (a) ayrık imajiner zaman (b) sürekli imajiner zaman



Şekil 2.13. Dünya çizgileri (a) ayrık imajiner zaman gösterimi (b) sürekli imajiner zaman gösterimi

Loop algoritması ile sürekli imajiner zamanda bir çevrim kümesi güncellemesi Şekil 2.14 ile örneklenmiştir.



Şekil 2.14. Loop algoritması güncelleme örneği

Şekil 2.14(a)'da güncellemeden önce dünya çizgileri konfigürasyonudur (kalın siyah çizgiler yukarı yönlü spinleri, ince gri çizgiler ise aşağı yönlü spinleri belirtmektedir). Şekil 2.14(b)'de dünya çizgileri konfigürasyonu ile kalın gri çizgilerle gösterilen çevrim kümesi mevcuttur. Şekil 2.14(c) ise kümedeki tüm spinlerin yönleri değiştirildikten sonraki dünya çizgileri konfigürasyonunu göstermektedir.

2.5. Ortalama Değerler ve Termodinamik Nicelikler

Örgü modelinde bölüşüm fonksiyonu ve A gözlenebilirinin beklenen değeri $\beta = \frac{1}{k_B T}$ sıcaklığın tersi, T sıcaklık, k_B Boltzman sabiti olmak üzere sırasıyla Denklem 2.61 ve Denklem 2.62 ile verilmiştir.

$$Z = Tr[e^{-\beta \hat{H}}] \quad (2.60)$$

$$\langle A \rangle = \frac{Tr[Ae^{-\beta \hat{H}}]}{Tr[e^{-\beta \hat{H}}]} \quad (2.61)$$

Çok parçacıklı kuantım sistemlerin istatistik mekaniğinde en büyük sorun Hamiltoniyendir. Çünkü gözlenebilirler büyük matrislerdir. MZMC tekniğini uygulamak için ve beklenen değerleri hesaplamak için $\langle A \rangle$ 'yı, verteks ağırlıkları $W(S)$, gözlenebilire ait olan $A(S)$ değerlendiriciler (estimator) ile temsil etmek önemlidir.

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_S A(S)W(S)}{\sum_S W(S)} \quad (2.62)$$

Loop algoritmasında graf konfigürasyonu G , sistemin fiziksel özellikleri hakkında gani gani bilgi içermektedir. Loop algoritması ile bağlantılanıp ölçüm hatalarını azaltmak için geliştirilmiş değerlendiriciler kullanılmaktadır (Evertz ve ark., 1993; Harada & Kawashima, 2001)s. Bir A gözlenebilirinin termal ortalaması graf değişkeni G üzerinden $A(G)$ ortalaması,

$$A(G) = \frac{\sum_S A(S)\Delta(S,G)}{\sum_S \Delta(S,G)} \quad (2.63)$$

$A(G)$, $A(S)$ 'nin $N_S(G)$ çevrim sayısı olmak üzere $2^{N_S(G)}$ dünya çizgileri konfigürasyonları üzerinden basit ortalamasıdır.

$$\langle A(G) \rangle_G = \frac{1}{Z} \sum_G A(G)W(G) = \frac{1}{Z} \sum_G \left[\frac{\sum_S A(S)\Delta(S,G)}{\sum_S \Delta(S,G)} \right] [\sum_S \Delta(S,G)V(G)] \quad (2.64)$$

$$\langle A(G) \rangle_G = \frac{1}{Z} \sum_S A(S) [\sum_G \Delta(S,G)V(G)] = \langle A(S) \rangle_S$$

$\langle A(G) \rangle_G = \langle A(S) \rangle_S$ olduğu gösterildikten sonra genelde $A(G)$ 'yi hesaplamanın çok maliyetli olduğu söylenebilir. $2^{N_S(G)}$ adet farklı dünya çizgisi konfigürasyonu üzerinden

alınan bir toplamın hesaplanması gerçekten maliyetlidir. A(G), geliştirilmiş değerlendiriciler kullanılarak orijinal bir fiziksel sistemde bulunan simetriler yardımıyla daha kolay bir biçimde hesaplanabilir. Ayrıca korelasyon fonksiyonları için geliştirilmiş değerlendiriciler inşa edilip korelasyon fonksiyonlarının hesabı kolaylaştırılabilir.

Sistemdeki mıknatıslanmanın beklenen değeri, enerji, özısı ve manyetik duygunluk sırasıyla Denklem 2.64, Denklem 2.65, Denklem 2.65, Denklem 2.67 ile verilmektedir.

$$M_{\alpha} = \sum_i S_i^{\alpha} \quad (\alpha = x, y, z) \quad (2.64)$$

$$E = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (2.65)$$

$$C = -k_B \beta^2 \frac{\partial E}{\partial \beta} \quad (2.66)$$

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_T \quad (2.67)$$

2.6. Lokalize Dolaşıklığın Sınırları

Dolaşıklığı bir kaynak olarak kullanmanın önemi dolaşıklığın ölçülmesi için bir çok yöntemin ortaya çıkmasına neden olmuştur. Burada kaynak ile belirtilen kuantum hesaplama, ışınlama veya kuantum haberleşme, vb için kullanılabilir olması halidir. Çok parçacıklı sistemlerde dolaşıklığın ölçülmesi için farklı yaklaşımlara ihtiyaç duyulmuştur. Bunlardan bir tanesi sistemde dolaşıklığı, iki parçalı dolaşıklık ölçümü üzerinden tanımlamaktır. Yardımcı dolaşıklık, oluşum dolaşıklığı (entanglement of formation)(Bennett, DiVincenzo, Smolin, & Wootters, 1996) benzer nitelikte bir kavram olmak üzere az önce tanımlanan yöntemi temsil etmektedir.

Beyza, Ayla ve Ceren, hep beraber bir oyun oynasınlar. Her biri $|\varphi^{ABC}\rangle$ saf durumu ile tanımlanan üç parçalı kuantum sistemin birçok kopyasına sahip olan bu üçlüden Beyza ve Ayla, Ceren'den izole bir şekilde tarif edilsin (2.68).

$$\rho^{AB} = \text{tr}_C |\varphi^{ABC}\rangle \langle \varphi^{ABC}| \quad (2.68)$$

Ayla ve Beyza'nın ortak kuantum sistemlerini ışınlama görevi için kullanmaya ihtiyaç duyduklarını farz edin. Bununla birlikte Ceren ise sistemi Beyza ve Ayla'nın kullanımı

için uygun durumda değildir. Ceren'in diğerlerine yardımcı olmak için yapabileceği bir şey vardır. O da sahip olduğu her sistem üzerinden bir ölçüm almaktır. Böylece Ayla ve Beyza, Ceren'in ölçüm çıktıları üzerine dayandırılmış saf hallere sahip olacaklardır. Ceren, bu klasik bilgiyi ilettiğinde, Ayla ve Beyza bu bilgiyi kullanabileceklerdir. Örneğin Ceren'in bazı ölçümleri Ayla ve Beyza'nın $|\varphi^{AB}\rangle$ saf hallere sahip olduğunu ortaya koyuyorsa, bu kuantum hallerini maksimum dolaşık singlet durumlara $S(\rho^A)$ oranında dönüştürebilirler (Bennett, Brassard, et al., 1996).

$$S(\rho^A) = -\text{tr}(\rho^A \log_2 \rho^A) \quad (2.69)$$

Genel bir deyişle, p_i olasılıkla $|\varphi_i^{AB}\rangle$ hallerini yaratan bir ölçüm için $(\rho^A = \text{tr}_B |\varphi^{AB}\rangle \langle \varphi^{AB}|)$ örneğin $\varepsilon = \{p_i, |\varphi_i^{AB}\rangle \langle \varphi^{AB}|\}$ topluluğu için, singlet hallere ortalama dönüşüm oranı Denklem 2.70'deki gibi olacaktır.

$$E(\varepsilon) = \sum_i p_i S(\rho_i^A) = -\sum_i p_i \text{tr}(\rho_i^A \log_2 \rho_i^A) \quad (2.70)$$

Ceren, Beyza ve Ayla'nın arkadaşı olduğundan kendi ölçümünü seçebilir ve böylece bu ortalama maksimize olmuş olur. Bu maksimizasyon işlemi, $\rho^{AB} = \sum_i p_i |\varphi_i^{AB}\rangle \langle \varphi_i^{AB}|$ tüm olası ε toplulukları üzerinden yapılabilir (Hughston, Jozsa, & K. Wootters, 1993). Böylece yardımcı dolaşıklık, $A(\rho^{AB})$, Denklem 2.71'deki gibi tanımlanabilir.

$$A(\rho^{AB}) = \max_{\varepsilon} E(\varepsilon) \quad (2.71)$$

Dolaşıklığın belirlenmesindeki zorluk, tüm olası lokal ölçüm stratejileri üzerinden bir optimizasyonu kapsıyor olmasıdır. Hal böyle iken yapılacak şey üst ve alt sınırlarını, belirlemeye çalışmak olacaktır. Üst sınır, spinlerin geri kalan kısmı üzerinde yapılan ortak ölçümleri göz önünde bulundurmadan kaynaklanmaktadır. Alt sınır hakkında bir çıkarım, iki spin arasındaki mevcut korelasyonların azalmayacağı yönünde lokal ölçümlerin bulunduğu söylemi ispatlanarak yapılabilir. N-kubit GHZ hali (Denklem 2.70) ele alınarak basit bir örnekleme yapılabilir.

$$|GHZ_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}(|00 \dots 0\rangle + |11 \dots 1\rangle) \quad (2.70)$$

Bu durumda lokalize dolaşıklık, iki rastgele spinin arasında $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ bazlarında ve diğer kubitleri ölçerek bir Bell durumu yaratmak için olabildiği kadar maksimumdur.

Sistemdeki iki spin korelasyonlarının hesaplanması dolaşıklığın üst ve alt sınırlarının bulunması için önemlidir. Dolaşıklığın alt sınırı, klasik iki spin Q_{ij}^{xx} , Q_{ij}^{yy} ve Q_{ij}^{zz} korelasyonlarının bazlarında en büyük değeri bulunarak elde edilir. Bu kuantum korelasyonların varlığı klasik korelasyon fonksiyonlarını (Denklem 2.71) çalışarak ortaya çıkartılabilir.

$$Q_{ij}^{ab}(|\varphi\rangle\langle\varphi|) = \langle\varphi|\sigma_i^a \otimes \sigma_j^b|\varphi\rangle - \langle\varphi|\sigma_i^a|\varphi\rangle\langle\varphi|\sigma_j^b|\varphi\rangle \quad (2.71)$$

$$Alt\ limit \equiv \max(|Q_{ij}^{xx}|, |Q_{ij}^{yy}|, |Q_{ij}^{zz}|) \quad (2.72)$$

i ve j indisleri, ilgilenilen spinlerin pozisyonlarını, σ_i^a ve σ_j^b Pauli matrislerini temsil etmektedir. Genelde klasik korelasyonların varlığı/yokluğu iki spin arasında oluşturulabilecek dolaşıklığı kabaca belirler. Herhangi bir çift spin arasında klasik korelasyonlar sunan hayli dolaşık kuantum durumları örnekleri verilebilir. Ising Hamiltoniyeni aksiyonu altında, başlangıçta ayrılabilir durumun birimsel evrimi ile elde edilen küme durumları ele alınsın (Briegel & Raussendorf, 2001).

$$|\varphi_N\rangle = \frac{1}{2^{\frac{N}{2}}} \left(\bigotimes_{i=1}^{N-1} (|0\rangle_i \sigma_z^{i+1} + |1\rangle_i) \right) (|0\rangle_N + |1\rangle_N) \quad (2.73)$$

$N \geq 5$ olduğu durumlarda, $|GHZ_N\rangle$ hali oluşmaz. Bununla birlikte, N-2 kubit üzerine uygun lokal ölçümler, diğer iki spin arasında daima bir Bell durumu yaratır. Bu da lokalize dolaşıklığın maksimum olduğunu gösterir.

N spinden oluşan saf bir $|\varphi\rangle$ hali göz önüne alınsın. Lokalize dolaşıklık, $E_{ij}(\varphi)$, ortalamada, i ve j spinleri arasında diğer spinler üzerinde ölçümler yaparak oluşturulabilecek dolaşıklığın maksimum değeri olarak tanımlanır. Daha özele inildiğinde, her ölçüm tabanı, en az 2^{N-2} elemandan (s indisi ile sayılan) oluşan saf bir $\varepsilon = \{P_s, |\phi_s\rangle\}$ topluluğu belirtir. Bu notasyonda, P_s , N parçalı spin sistemindeki asistan spinler üzerinde $|s\rangle$ ölçümü alındıktan sonra iki spin durumu $|\phi_s\rangle$ 'nin elde edilme olasılığını ifade eder. Böylece lokalize dolaşıklık Denklem 2.74'deki gibi tanımlanabilir.

$$E_{ij} = \max_{\varepsilon} \sum_s P_s E(|\phi_s\rangle) \quad (2.74)$$

$E(|\phi_s\rangle)$, $|\phi_s\rangle$ halinin dolaşıklığını ifade eder. İki kubitin saf durumları ele alındığında tüm dolaşıklık ölçümleri özünde denktir ve korelasyon fonksiyonları ile bağlantı kurmak için dolaşıklık “concurrence” (Wootters, 1998) eliyle ölçülebilir: saf bir durumdaki iki kubitin korelasyon fonksiyonunun maksimumu ($C(|\phi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle) = 2|ad - bc|$) ile verilen “concurrence” ile örtüşmektedir. Lokalize dolaşıklığın bu davranışı dolaşıklık entropisi cinsinden tanımlandığı ile çok benzerdir.

İki parçalı sistemlerde, karışık kuantum hallerde dolaşıklığın miktarının belirlenmesi için *yardımcı dolaşıklık* olarak adlandırılan yeni bir yöntem keşfedilmiştir. İki parçalı sistemi tanımlayan yoğunluk matrisi ile uyumlu tüm topluluklar üzerinden hesaplanan maksimum ortalama dolaşıklık olduğu gösterilmiştir. Bir topluluğun ortalama dolaşıklığı lokal birimsel dönüşümler altında değişmeden kalır ve LOCC altında artmazlar. Bu yüzden yardımcı dolaşıklık bazı özelliklere sahiptir. Buna ek olarak yoğunluk matrisinin olası tüm saf durumları üzerinden bir maksimizasyon işlemi olduğu için yardımcı dolaşıklık konkavdır.

$$A(\sum_i p_i \rho_i) \geq \sum_i p_i A(\rho_i) \quad (2.75)$$

Yardımcı dolaşıklık, saf durumlar üzerinde kısmi entropileri ile uyuşan tüm konkav fonksiyonların en küçüğüdür. Kısmi entropi sistemin diğer kısmının gördüğü entropidir. Oluşum dolaşıklığı ise aynı özelliğe sahip en büyük konveks fonksiyondur.

Diğer spinler üzerinde yapılması izinli global veya bileşik ölçümler halinde lokalize dolaşıklığa tekabül eden durum yardımcı dolaşıklıktır (DiVincenzo ve ark., 1999). Dolaşıklığın üst sınırını hesaplamak için gerekli ifade Denklem 2.76’de belirtildiği gibidir.

$$\text{Üst limit} \equiv \sqrt{\frac{(1 + \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle)^2 - (\langle \sigma_i^z \rangle + \langle \sigma_j^z \rangle)^2}{4}} + \sqrt{\frac{(1 + \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle)^2 - (\langle \sigma_i^z \rangle - \langle \sigma_j^z \rangle)^2}{4}} \quad (2.76)$$

3. BULGULAR VE TARTIŞMA

3.1. Heisenberg Hamiltoniyeni ve Dipol-Dipol Etkileşmesi

Bu çalışmada kuantum dolaşıklığın incelendiği spin-1/2 zincirinde, sistemi temsil eden dipol-dipol etkileşmesi, takas etkileşmesi ve Zeeman enerjisinin dahil edildiği hamiltoniyen Denklem 3.1’ de belirtilmiştir. Tez çalışmasını özgün kılan, incelenen spin zincirinde dipolar etkileşmenin varlığının tüm spin çiftleri için hesaba dahil edilmesidir.

$$\hat{H} = - \underbrace{\sum_{i=1}^N (J_x \hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + J_y \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + J_z \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z)}_{\hat{H}_{takas}} - \underbrace{\frac{B_z}{2} \sum_{i=1}^N (\hat{S}_i^z + \hat{S}_{i+1}^z)}_{\hat{H}_{Zeeman}} + \underbrace{D \sum_{\langle j \neq k \rangle}^N \left(\frac{\vec{S}_j \cdot \vec{S}_k}{r_{jk}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{jk})(\vec{S}_k \cdot \vec{r}_{jk})}{r_{jk}^5} \right)}_{\hat{H}_{dipol-dipol}} \quad (3.1)$$

Burada J_x , J_y ve J_z takas sabitleri; B_z , +z doğrultusunda uygulanan harici düzgün manyetik alan ve D ise dipol-dipol sabitidir. D , dipolar etkileşmenin gücünü belirlemek için hamiltoniyen ifadesine eklenmiştir. Denklem 3.1’ deki ifadede dipol-dipol etkileşmesinin sistemde bulunan tüm spin çiftleri üzerinden hesaba dahil edildiği aşıkard olmalıdır. Hamiltoniyeni Suzuki-Trotter dekompozisyonuna uygun hale getirmek için dipol terimini inceleyelim:

$$\hat{H}_{dipol} = D \sum_{\langle j \neq k \rangle}^N \left(\frac{\vec{S}_j \cdot \vec{S}_k}{r_{jk}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{jk})(\vec{S}_k \cdot \vec{r}_{jk})}{r_{jk}^5} \right) \quad (3.2)$$

Hamiltonyen genel ifadesinde dipol terimindeki indisleri karışıklık olmaması için j ve k olarak seçmiştik. Dipol terimini incelerken bu indisler yerine i ve j indislerini kullanmak hesaplama açısından herhangi bir değişiklik yaratmamakla beraber kolaylık sağlayacaktır. Dipol-dipol etkileşmesinin hamiltonyen ifadesi yeni indisleri ile Denklem 3.3 halini alır.

$$\hat{H}_{dipol} = D \sum_{\langle i \neq j \rangle}^N \left(\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right) \quad (3.3)$$

Spin uzayında r_{ij} konum ifadesi iki spin arasındaki mesafeyi belirtmektedir. (Denklem 3.4)

$$\vec{r}_{ij} = (x_i - x_j)\hat{i} + (y_i - y_j)\hat{j} + (z_i - z_j)\hat{k} \quad (3.4)$$

Hesaplamaları kolaylaştırma açısından vektörel ifadesi Denklem 3.4 ile verilen mesafe faktörü Denklem 3.5 teki gibi sembolize edilerek dipol teriminde kullanılmıştır.

$$d_{xx} = (x_i - x_j)^2, \quad d_{yy} = (y_i - y_j)^2, \quad d_{zz} = (z_i - z_j)^2$$

$$d_{xy} = (x_i - x_j)(y_i - y_j), \quad d_{xz} = (x_i - x_j)(z_i - z_j), \quad d_{yz} = (y_i - y_j)(z_i - z_j) \quad (3.5)$$

Denklem 3.4 ve Denklem 3.5 yardımıyla dipol terimi Denklem 3.6 ve Denklem 3.7' deki halini almıştır.

$$\hat{H}_{dipol} = D \sum_{<i \neq j>}^N \left[\frac{\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z}{r_{ij}^3} \right]$$

$$- D \sum_{<i \neq j>}^N 3 \frac{[\hat{S}_i^x (x_i - x_j) + \hat{S}_i^y (y_i - y_j) + \hat{S}_i^z (z_i - z_j)][\hat{S}_j^x (x_i - x_j) + \hat{S}_j^y (y_i - y_j) + \hat{S}_j^z (z_i - z_j)]}{r_{ij}^5} \quad (3.6)$$

$$\hat{H}_{dipol} = D \sum_{<i \neq j>}^N \left[\frac{\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z}{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^{\frac{3}{2}}} \right]$$

$$- D \sum_{<i \neq j>}^N 3 \frac{d_{xx} \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + d_{yy} \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y + d_{zz} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + d_{xy} (\hat{S}_i^x \hat{S}_j^y + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^x)}{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \quad (3.7)$$

$$- D \sum_{<i \neq j>}^N 3 \frac{d_{xz} (\hat{S}_i^x \hat{S}_j^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^x) + d_{yz} (\hat{S}_i^y \hat{S}_j^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^y)}{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^{\frac{5}{2}}}$$

Dipol teriminde takas etkileşmesine benzer biçimde aynı uzayda etkili ikili spin çiftleri dikkat çekmektedir. Hamiltoniyeni dekompozisyona hazır hale getirmek için dipol terimi ve Hamiltoniyenin genel ifadesinin düzenlenmesi kolaylık sağlayacaktır.

$$\hat{H}_{dipol} = D \sum_{<i \neq j>}^N \left[\frac{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^2 - 3d_{xx}}{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \frac{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^2 - 3d_{yy}}{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right]$$

$$+ \frac{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^2 - 3d_{zz}}{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{3d_{xy} (\hat{S}_i^x \hat{S}_j^y + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^x)}{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^{\frac{5}{2}}} - \frac{3d_{xz} (\hat{S}_i^x \hat{S}_j^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^x)}{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^{\frac{5}{2}}} - \frac{3d_{yz} (\hat{S}_i^y \hat{S}_j^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^y)}{(d_{xx} + d_{yy} + d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \quad (3.8)$$

Bu çalışmada dipol-dipol etkileşmesi sadece en yakın komşu spinler üzerinden hesaplanacaktır. Böylece 3.8 ifadesinde tüm j indisleri yerine i+1 yazıldığında Denklem 3.9 elde edilir.

$$\begin{aligned}\hat{H}_{dipol} &= D \sum_{\langle i \neq j \rangle}^N \left[\frac{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^2-3d_{xx}}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \frac{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^2-3d_{yy}}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y \right] \\ &D \sum_{\langle i \neq j \rangle}^N \left[\frac{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^2-3d_{zz}}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z - \frac{3d_{xy}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^y + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^x)}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \right] \\ &D \sum_{\langle i \neq j \rangle}^N \left[-\frac{3d_{xz}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^x)}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} - \frac{3d_{yz}(\hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^y)}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \right]\end{aligned}\quad (3.9)$$

Denklem 3.9 ifadesinde yer alan d_{xx} , d_{yy} , d_{zz} , d_{xy} , d_{yz} ve d_{xz} terimlerini, dipol teriminin, hamiltoniyeenin genel ifadesine entegrasyonunda olası bir karışıklığı önlemek için $f_{\alpha\alpha}$ ve $g_{\alpha\beta}$ sabitleri cinsinden tekrar yazılmıştır. Ayrıca dipol sabiti D de bu sabitler cinsinden ifade edilmiştir. Bu ifadeler Denklem 3.10 ve 3.11 ile verilmiştir.

$$f_{xx} = D \frac{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^2-3d_{xx}}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \quad (3.10a)$$

$$f_{yy} = D \frac{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^2-3d_{yy}}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \quad (3.10b)$$

$$f_{zz} = D \frac{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^2-3d_{zz}}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \quad (3.10c)$$

$$g_{xy} = D \frac{3d_{xy}}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \quad (3.11a)$$

$$g_{xz} = D \frac{3d_{xz}}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \quad (3.11b)$$

$$g_{yz} = D \frac{3d_{yz}}{(d_{xx}+d_{yy}+d_{zz})^{\frac{5}{2}}} \quad (3.11c)$$

Dipol etkileşme teriminin son halinin hamiltoniyeinin genel ifadesine eklendiğinde Denklem 3.12 elde edilir.

$$\begin{aligned}\hat{H} = & -\sum_i^N [(J_x - f_{xx})\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + (J_y - f_{yy})\hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + (J_z - f_{zz})\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z] \\ & -\frac{B_z}{2}\sum_i^N (\hat{S}_i^z + \hat{S}_{i+1}^z) - \sum_i^N [g_{xy}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^y + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^x) \\ & + g_{xz}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^x) + g_{yz}(\hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^y)]\end{aligned}\quad (3.12)$$

Bölüm 2.1’ de belirtilen Trotter dekompozisyon metodunu uygulamak için Hamiltoniyein iki parçaya bölünmüştür.

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B \quad (3.13)$$

Denklem 3.13 ile gösterilen bu iki parçalı hamiltoniyein için her parça Denklem 2.3 ($\hat{H}_A = \sum_{i \text{ çift}} \hat{H}_i$ ve $\hat{H}_B = \sum_{i \text{ tek}} \hat{H}_i$) deki gibi çift ve tek terimlerin toplamının bir ifadesidir. Ayrıca hatırlanması gereken önemli bir ayrıntı da $[\hat{H}_A, \hat{H}_B] \neq 0$ olması yani $\hat{H}_A$ ve $\hat{H}_B$ birbirleriyle sıra değiştirmemesine rağmen bunlara bağlı sınır hamiltonyenleri, tamamı tek ve tamamı çift olan hamiltonyenler aralarında sıra değiştirebilecek şekilde belirlendiği için komütatifler ($[\hat{H}_i, \hat{H}_j] = 0$).

$$\begin{aligned}\hat{H} = & -\sum_i^N [(J_x - f_{xx})\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + (J_y - f_{yy})\hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + (J_z - f_{zz})\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z] \\ & -\frac{B_z}{2}\sum_i^N (\hat{S}_i^z + \hat{S}_{i+1}^z) - g_{xy}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^y + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^x) \\ & -g_{xz}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^x) - g_{yz}(\hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^y)]\end{aligned}\quad (3.14)$$

Sonraki adımda Denklem 2.15 ile verilen verteks enerjileri hesaplanacaktır. Bunun için öncelikle $\hat{O} = e^{-\Delta\tau \hat{H}_i}$ operatörü lineer hale getirilmelidir. Suzuki-Trotter dekompozisyonu ile beraber Denklem 3.15 ile verilen Zassenhaus formülü uygulanarak $\hat{O}$ operatörü verteks enerjilerini hesaplamak için uygun hale getirilecektir.

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}e^{\frac{1}{6}(2[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]])} \dots \quad (3.15)$$

Zassenhaus formülünün ilk üç teriminin hesaplanması yeterli olacaktır. Sırasıyla $\hat{A}$, $\hat{B}$ ve $[\hat{A}, \hat{B}]$ ler hesaplanıp $\hat{O}$ operatörünün olası tüm ikili spin halleri üzerinden verteks enerjileri elde edilecektir. Bu enerji ifadeleri simülasyon süresince bir önceki halden deneme haline geçiş ihtimallerini hesaplarken kullanılacaktır.

$$\hat{A} = -[(J_x - f_{xx})\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + (J_y - f_{yy})\hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + (J_z - f_{zz})\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z] - \frac{B_z}{2}(\hat{S}_i^z + \hat{S}_{i+1}^z) \quad (3.16)$$

$$\hat{B} = -[g_{xy}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^y + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^x) + g_{xz}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^x) + g_{yz}(\hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^y)]$$

Denklem 3.16 ile belirlenen $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ operatörleri yardımıyla,

$$e^{\Delta\tau\hat{A}} = e^{\Delta\tau[(J_x - f_{xx})\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + (J_y - f_{yy})\hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + (J_z - f_{zz})\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z] + \frac{\Delta\tau B_z}{2}(\hat{S}_i^z + \hat{S}_{i+1}^z)}$$

ve

$$e^{\Delta\tau\hat{B}} = e^{\Delta\tau[g_{xy}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^y + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^x) + g_{xz}(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^x) + g_{yz}(\hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^z + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^y)]}$$

sırasıyla Denklem 3.17 ve 3.18 elde edilir. Burada $K_f = \frac{\Delta\tau B_z}{4}$, $K_x = \frac{\Delta\tau}{4}(J_x - f_{xx})$, $K_y = \frac{\Delta\tau}{4}(J_y - f_{yy})$, $K_z = \frac{\Delta\tau}{4}(J_z - f_{zz})$, $T_{xy} = \frac{\Delta\tau}{4}g_{xy}$, $T_{xz} = \frac{\Delta\tau}{4}g_{xz}$ ve $T_{yz} = \frac{\Delta\tau}{4}g_{yz}$ dir. Akabinde $[\hat{A}, \hat{B}]$ komütasyon bağıntısı hesaplandıktan sonra $e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$ ya uygulanıp $\hat{O}$ son halini alır.

$$e^{\Delta\tau\hat{A}} \approx (\cosh(K_x) + \sinh(K_x)\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x)(\cosh(K_y) + \sinh(K_y)\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y) \\ (\cosh(K_z) + \sinh(K_z)\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z)(\cosh(K_f) + \sinh(K_f)\hat{\sigma}_i^z) \quad (3.17)$$

$$(\cosh(K_f) + \sinh(K_f)\hat{\sigma}_{i+1}^z)$$

$$e^{\Delta\tau\hat{B}} \approx (\cosh(T_{xy}) + \sinh(T_{xy})\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^y)(\cosh(T_{xy}) + \sinh(T_{xy})\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^x) \\ (\cosh(T_{xz}) + \sinh(T_{xz})\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^z)(\cosh(T_{xz}) + \sinh(T_{xz})\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^x) \quad (3.18)$$

$$(\cosh(T_{yz}) + \sinh(T_{yz})\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^z)(\cosh(T_{yz}) + \sinh(T_{yz})\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^y)$$

Spin projeksiyon operatörleri arasındaki işlem ilişkisini $\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l = i\epsilon_{klm} \hat{\sigma}_m$ eşitliği ile kurarak, komütasyon bağıntısını ve diğer operatör eksponansiyeller bulunabilir. Burada k, l ve m indisleri x, y ve z kartezyen uzayı belirtirken ϵ_{klm} , Levi-Civita sembolüdür. $\Delta\tau[\hat{A}, \hat{B}]$ komütasyon bağıntısının sonucu Denklem 3.19 da açıkça görülmektedir.

$$\begin{aligned}
\Delta\tau[\hat{A}, \hat{B}] = & (2K_f T_{xz} + 2i(K_y T_{yz} - K_z T_{yz}))(\hat{\sigma}_i^x + \hat{\sigma}_{i+1}^x) \\
& + (2K_f T_{yz} + 2i(K_x T_{xz} - K_z T_{xz}))(\hat{\sigma}_i^y + \hat{\sigma}_{i+1}^y) \\
& + 2i(K_x T_{xy} - K_y T_{xy})(\hat{\sigma}_i^z + \hat{\sigma}_{i+1}^z) + 4iK_f T_{xy}(\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y - \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x) \\
& + 2K_z T_{xy}(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^y + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^x) + 2(K_y T_{xz} - K_f T_{yz})(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^x) \\
& + 2i(K_f T_{xz})(\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^y)
\end{aligned} \tag{3.19}$$

$e^{-\frac{\Delta\tau}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$ ifadesini, Denklem 3.19'deki $\Delta\tau[\hat{A}, \hat{B}]$ komütasyonunun sonucundan faydalanarak bulabiliriz. Burada sabitlerin uzunluğu açısından meydana gelebilecek karışıklığı azaltmak için bu sabitleri kısa semboller ile temsil etmek aynı zamanda işlem kolaylığı da sağlayacaktır. Benzer şekilde Denklem 3.17 ve Denklem 3.18 deki eksponansiyel ifadeler hesaplanırken trigonometrik ve diğer sabitler de olası bir karışıklık için kısa semboller ile

$$\begin{aligned}
e^{4\tau\hat{A}} \approx & A_1 \mathbb{I} + A_2(\hat{\sigma}_i^z + \hat{\sigma}_{i+1}^z) + A_3\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + A_4\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x \\
& + A_5\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y + A_6(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^y + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^x)
\end{aligned} \tag{3.20}$$

$$\begin{aligned}
e^{4\tau\hat{B}} \approx & B_1 \mathbb{I} + B_2(\hat{\sigma}_i^x + \hat{\sigma}_{i+1}^x) + B_3(\hat{\sigma}_i^y + \hat{\sigma}_{i+1}^y) + B_4(\hat{\sigma}_i^z + \hat{\sigma}_{i+1}^z) \\
& + B_5\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + B_6\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y + B_7\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z \\
& + B_8(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^y + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^x) + B_9(\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^y) + B_{10}(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^x)
\end{aligned} \tag{3.21}$$

$$\begin{aligned}
e^{-\Delta\tau \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{2}} &\approx (\cosh(C_{1r}) + \sinh(C_{1r})(\hat{\sigma}_i^x + \hat{\sigma}_{i+1}^x)) \\
&(\cos(C_{1i}) + \sin(C_{1i})(\hat{\sigma}_i^x + \hat{\sigma}_{i+1}^x))(\cosh(C_{2r}) + \sinh(C_{2r})(\hat{\sigma}_i^y + \hat{\sigma}_{i+1}^y)) \\
&(\cos(C_{2i}) + \sin(C_{2i})(\hat{\sigma}_i^y + \hat{\sigma}_{i+1}^y))(\cos(C_3) + \sin(C_3)(\hat{\sigma}_i^z + \hat{\sigma}_{i+1}^z)) \\
&(\cos(C_4) - \sin(C_4)(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x))(\cos(C_4) + \sin(C_4)(\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y)) \\
&(\cosh(C_5) + \sinh(C_5)(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^y + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^x)) \\
&(\cosh(C_6) + \sinh(C_6)(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^x)) \\
&(\cos(C_7) + \sin(C_7)(\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^y))
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Böylece O_i operatör sabitlerini temsil etmek üzere $\hat{O}$ operatörünün aldığı son hal Denklem 3.23 ile verilmiştir.

$$\begin{aligned}
\hat{O} &= O_1 + O_2(\hat{\sigma}_i^x + \hat{\sigma}_{i+1}^x) + O_3(\hat{\sigma}_i^y + \hat{\sigma}_{i+1}^y) + O_4(\hat{\sigma}_i^z + \hat{\sigma}_{i+1}^z) \\
&+ O_5\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + O_6\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y + O_7\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + O_8(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^y + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^x) \\
&+ O_9(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^x) + O_{10}(\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^y)
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Operatör sabitleri Ek-a'da verilmiştir. Artık $\hat{O}$ operatörü, verteks enerjileri kolayca hesaplanabilecek duruma getirilmiş bulunmaktadır. Unutulmaması gereken nokta bu operatörün temsil ettiği manyetik sistemin hamiltoniyenine Heisenberg Hamiltoniyenine ek olarak sadece en yakın komşu spinler için dipol-dipol etkileşmesinin eklenmiş olmasıdır.

Verteks enerjilerini hesaplamadan önce işlem kolaylığı açısından $\hat{O}$ operatöründe bulunan ikili spin operatörlerinden $\hat{S}_i^x, \hat{S}_{i+1}^x, \hat{S}_i^y$ ve $\hat{S}_{i+1}^y$ yi $\hat{S}_i^+, \hat{S}_{i+1}^+, \hat{S}_i^-$ ve $\hat{S}_{i+1}^-$ cinsinden ifade edebiliriz. Denklem 3.25 ta belirtilen eşitlikleri kullanarak $\hat{O}$ operatörünün son hali Denklem 3.26 belirlenmiştir.

$$\hat{S}_i^x = \frac{\hat{S}_i^+ + \hat{S}_i^-}{2} \tag{3.25a}$$

$$\hat{S}_{i+1}^x = \frac{\hat{S}_{i+1}^+ + \hat{S}_{i+1}^-}{2} \tag{3.25b}$$

$$\hat{S}_i^y = \frac{\hat{S}_i^+ - \hat{S}_i^-}{2i} \quad (3.25c)$$

$$\hat{S}_{i+1}^y = \frac{\hat{S}_{i+1}^+ - \hat{S}_{i+1}^-}{2i} \quad (3.25d)$$

$$\begin{aligned} \hat{O} = & O_1 + (O_2 - iO_3)(\hat{S}_i^+ + \hat{S}_{i+1}^+) + (O_2 + iO_3)(\hat{S}_i^- + \hat{S}_{i+1}^-) \\ & + (O_5 - O_6 - 2iO_8)\hat{S}_i^+\hat{S}_{i+1}^+ + (O_5 - O_6 + 2iO_8)\hat{S}_i^-\hat{S}_{i+1}^- \\ & + (O_5 + O_6)(\hat{S}_i^+\hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^-\hat{S}_{i+1}^+) + (O_9 - iO_{10})(\hat{S}_i^+\hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z\hat{S}_{i+1}^+) \\ & + (O_9 + iO_{10})(\hat{S}_i^-\hat{\sigma}_{i+1}^z + \hat{\sigma}_i^z\hat{S}_{i+1}^-) + O_4(\hat{\sigma}_i^z + \hat{\sigma}_{i+1}^z) + O_7\hat{\sigma}_i^z\hat{\sigma}_{i+1}^z \end{aligned} \quad (3.26)$$

$\hat{O}$ operatörünün açıkça elde edilmesi ile yoğunluk matrisinin analitik ifadesi elde edilmiş oldu. Buradan hareketle sistemin bölüşüm fonksiyonu ve tüm termodinamik nicelikleri adi türev kullanarak MATLAB ortamında hesaplanmıştır. Ek-b’de O_i sabitlerinin Ek-a’da elde edilen sabitler arasındaki ilişki; Ek-c’de tüm verteks ağırlıkları dolayısıyla yoğunluk matrisinin elemanları verilmiştir. $\hat{O}$ operatörünün spin operatörleri baz fonksiyonlarına uygulanırken yardımcı olan eşitlikler Denklem 3.27’de belirtildiği gibidir.

$$\begin{aligned} \hat{S}^+|s, m_s\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)}|s, m_{s+1}\rangle \\ \hat{S}^-|s, m_s\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)}|s, m_{s-1}\rangle \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\hat{S}^z|s, m_s\rangle = \hbar m_s|s, m_s\rangle$$

İki-spin propagatörü T_{ij} ve yoğunluk matrisi ρ_{ij} sırasıyla Denklem 3.28 ve Denklem 3.29 ile vermiştir.

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} O_1 + 2O_4 + O_7 & O_9 - iO_{10} & O_9 - iO_{10} & O_5 - O_6 + 2iO_8 \\ O_9 + iO_{10} & O_1 - O_7 & O_1 - O_7 & O_9 - iO_{10} \\ O_9 + iO_{10} & O_5 + O_6 & O_5 + O_6 & O_9 - iO_{10} \\ O_5 - O_6 + 2iO_8 & -(O_9 + iO_{10}) & -(O_9 + iO_{10}) & O_1 - 2O_4 + O_7 \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

$$\rho_{ij} = T_{ij} / \text{Tr}[T_{ij}] \quad (3.29)$$

3.2. Ferromanyetik ve Antiferromanyetik XXX Modeli

Bu tez çalışmasında lokalize dolaşıklıkla hesaplanmasına ilk olarak ferromanyetik sistemlerden başlanmıştır. İzotropik XXX ve anizotropik XXZ sistemlerde kuantum dolaşıklık harici manyetik alanın varlığında ve sisteme dışarıdan herhangi bir manyetik etki bulunmadığı durumlarda incelenmiştir. Kuantum Monte Carlo simülasyon metodunun Metropolis algoritması kullanılarak uygulanması için öncelikle verteks ağırlıkları ve enerjileri hesaplanmıştır. Bir önceki bölümde $\hat{O}$ operatörünün en genel çözümü dipol-dipol etkileşmesinin 3 boyutlu kartezyen uzayda tüm spin katkılarını içerecek biçimde sunulmuştur. Bu çalışmanın amacı olan kuantum spin-1/2 zincirinin incelenmesi hususunda bazı kısıtlamalar gidilmiştir. $d_{\alpha\alpha}$ ve $d_{\alpha\beta}$ mesafe terimleri, $d_{xx} = 1, d_{yy} = 1, d_{zz} = 0, d_{xy} = 1, d_{xz} = 0$ ve $d_{yz} = 0$ olarak seçilmiştir. Böylece diğer sabitler de Denklem 3.30' deki halini almışlardır.

$$\begin{aligned} f_{xx} = f_{yy} &= \frac{D}{\sqrt{32}}, \quad f_{zz} = \frac{4D}{\sqrt{32}} \\ g_{xy} &= \frac{3D}{\sqrt{32}}, \quad g_{xz} = g_{yz} = 0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

Ayrıca izotropik XXX ve anizotropik XXZ sistemleri için $J_x = J_y = J_z$ ve $J_x = J_y \neq J_z$ dir. $\hat{O}_{XXA}$ operatörünün son hali, Denklem 3.31' de belirtilmiştir.

$$\begin{aligned} \hat{O}_{XXA} \approx & O_1 \mathbb{I} + O_2 \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + O_3 (\hat{S}_i^z + \hat{S}_{i+1}^z) + O_4 \hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^+ + O_5 \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^- \\ & + O_6 (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) + O_7 (\hat{S}_i^- \hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- \hat{S}_{i+1}^+) + O_8 (\hat{S}_i^+ \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+ \hat{S}_{i+1}^-) \end{aligned} \quad (3.31)$$

$W(s_P) \equiv \langle S_{i,j}^z, S_{i+1,j}^z | \hat{O}_{XXA} | S_{i,j+1}^z, S_{i+1,j+1}^z \rangle$ verteks ağırlıkları Ek-d' de belirtilmiştir. İki-spin propagatörü T_{ij} ve bölüşüm fonksiyonu Z sırasıyla Denklem 3.32 ve Denklem 3.33 ile vermiştir.

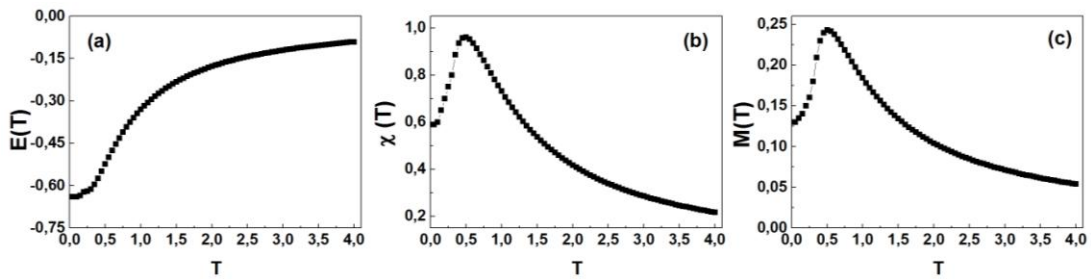
$$T_{ij} = \begin{pmatrix} O_1 + \frac{O_2}{4} + O_3 + O_8 & 0 & 0 & O_4 \\ 0 & O_1 - \frac{O_2}{4} & O_6 & 0 \\ 0 & O_6 & O_1 - \frac{O_2}{4} & 0 \\ O_5 & 0 & 0 & O_1 + \frac{O_2}{4} - O_3 + O_7 \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

$$Z = 4O_1 + O_7 + O_8 \quad (3.33)$$

$$\rho_{ij} = \frac{T_{ij}}{Z} = \begin{pmatrix} \frac{O_1 + \frac{O_2}{4} + O_3 + O_8}{4O_1 + O_7 + O_8} & 0 & 0 & \frac{O_4}{4O_1 + O_7 + O_8} \\ 0 & \frac{O_1 - \frac{O_2}{4}}{4O_1 + O_7 + O_8} & \frac{O_6}{4O_1 + O_7 + O_8} & 0 \\ 0 & \frac{O_6}{4O_1 + O_7 + O_8} & \frac{O_1 - \frac{O_2}{4}}{4O_1 + O_7 + O_8} & 0 \\ \frac{O_5}{4O_1 + O_7 + O_8} & 0 & 0 & \frac{O_1 + \frac{O_2}{4} - O_3 + O_7}{4O_1 + O_7 + O_8} \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

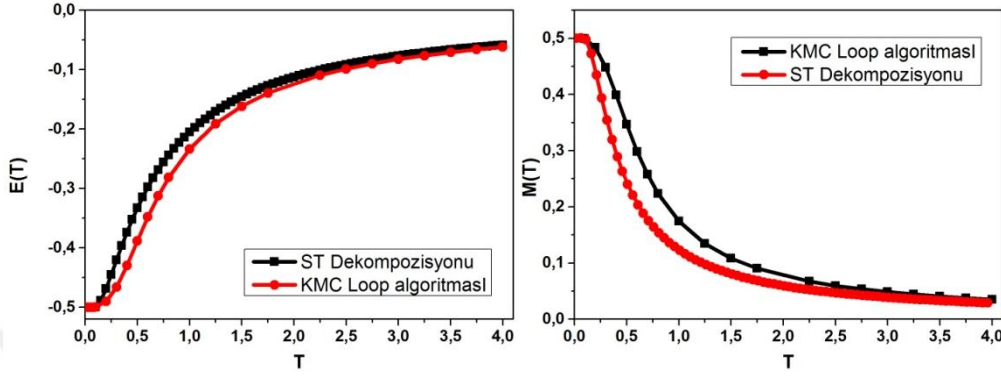
3.2.1. Ferromanyetik XXX Modeli

Bir önceki bölümde elde edilen bölüşüm fonksiyonu Z yardımıyla ferromanyetik XXX modeli için öncelikle sistemin enerji yoğunluğu (spin başına ortalama enerjisi), ortalama mıknatıslanması, manyetik duygunluğu, dolaşıklığın alt ve üst sınırları MATLAB ortamında nümerik olarak harici manyetik alan, B_z , ve dipol-dipol etkileşmesi sabiti, D 'nin bazı değerleri için hesaplanmıştır. Öncelikle dipol-dipol etkileşmesinin yokluğunda, termodinamik özellikleri ve tezin ana araştırma konusu olan dolaşıklığın sınırları farklı harici manyetik alan değerleri için belirlenmiştir (P Androvitsaneas, Fytas, Paspalakis, & Terzis, 2012). Anizotropik XY modeli için harici manyetik alan altında $m=10$ ve $N=20$ için analitik çözüm (Androvitsaneas ve ark, 2012) un sonuçları ile uyushmaktadır (Şekil 3.1).



Şekil 3.1. $J_x=2$, $J_y=1$, $J_z=0$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5$ harici manyetik alanı altında sıcaklığa bağlı olarak (a) enerji yoğunluğu (b) manyetik duygunluk (c) spin başına mıknatıslanma

Şekil 3.1(b) ve Şekil 3.1(c)'de manyetik duygunluk ve mıknatıslanmanın $T \approx 0.5$ değerinde maksimuma ulaşmıştır. Bu sıcaklık değeri kritik nokta olarak adlandırılabilir. Ayrıca Şekil 3.1(a) sistemin enerji yoğunluğunun bu kritik değerden itibaren eksponansiyel olarak arttığı aşıkardır.

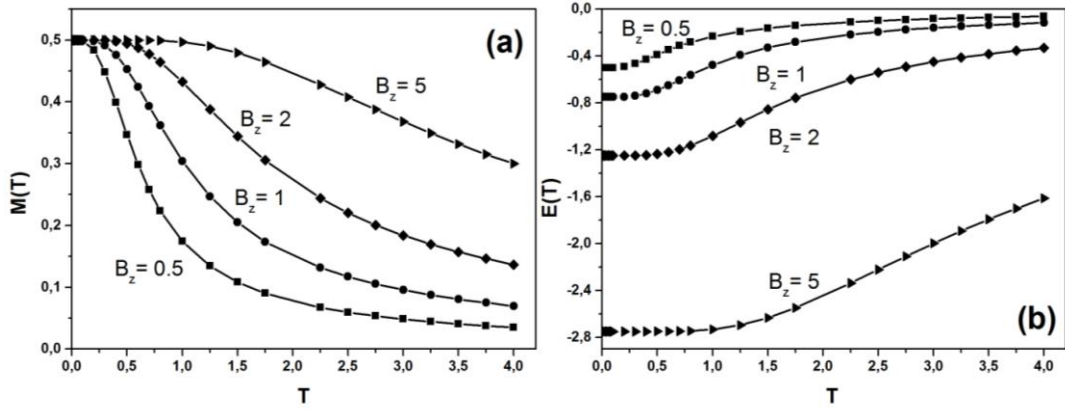


Şekil 3.2. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5$ harici manyetik alanı altında sıcaklığa bağlı olarak (a) enerji yoğunluğu (b) spin başına mıknatıslanma

$N=40$ adet quantum spin-1/2 zinciri oluşturulup Loop algoritması tabanlı Kuantum Monte Carlo simülasyonu ile sistemin termodinamik özellikleri ve dolaşıklık sınırları belirlenmiştir. Bunun için ALPS⁴ paket yazılımı paralel olarak koşturularak termodinamik nicelikler hesaplanmıştır. Ferromanyetik XXX modeli için ise harici manyetik alan $B_z = 0.5$ altında elde edilen sonuçlar da Şekil 3.2'de simülasyon sonuçları ile birlikte gösterilmiştir. Enerji yoğunluğu ve ortalama mıknatıslanma eğrileri incelendiğinde kritik nokta $T \approx 0.25$ civarındadır. Bununda birlikte Loop algoritması ile ST dekompozisyonu uygulanan durumda MATLAB ortamında alınan ölçümlerin benzer karakteristik gösterdiği gözlemlenmiştir. Diğer harici manyetik alanlar için alınan ölçümler ferromanyetik XXX modeli için Şekil 3.3 ile sunulmuştur.

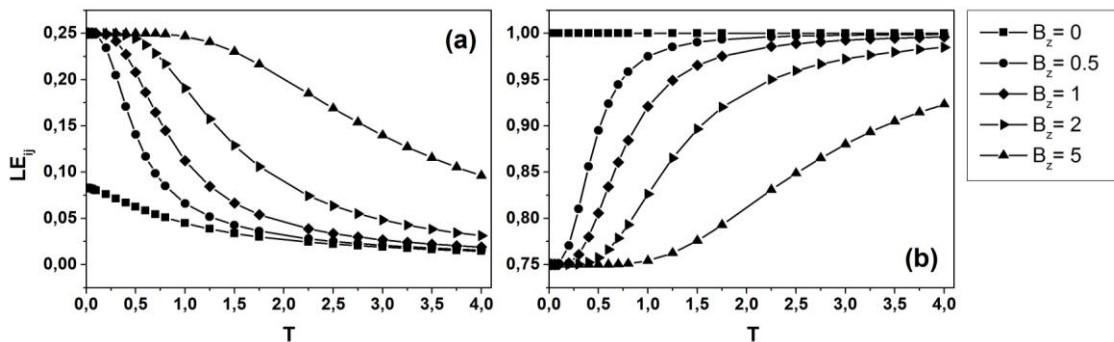
Bu aşamadan sonra sadece Loop algoritması kullanılarak elde edilen simülasyon sonuçları ile elde edilen lokalize dolaşıklık ölçümleri değerlendirilecektir.

⁴ http://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/Main_Page



Şekil 3.3. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) spin başına mıknatıslanma (b) enerji yoğunluğu

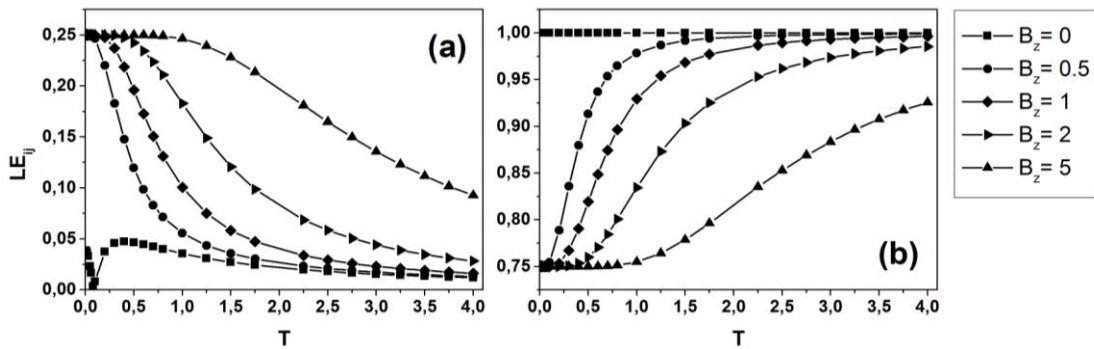
Şekil 3.3'te verilen faz diyagramı ve enerji yoğunluğu grafiklerinden anlaşılacağı üzere $B_z=5$ değeri büyük bir alan değerini temsil etmektedir. Harici alan arttıkça kritik sıcaklık değeri de artmakta ve harici alanın faz değişimi sıcaklığını arttırdığı görülmektedir. Lokalize dolaşıklık ölçümleri değerlendirilirken $B_z=5$ yüksek alan $B_z=0.5$ ise düşük alan değerleri olarak ele alınacaktır. Şekil 3.4(a) ve Şekil 3.4(b) de sırasıyla dolaşıklığın alt sınırı ve üst sınırı farklı harici alan değerleri için belirlenmiştir. Harici alan olmayan ölçümlerde dahil edilmiştir. Harici alan arttıkça artan sıcaklık göz önünde bulundurularak, çok düşük sıcaklıklar hariç, dolaşıklığın alt sınırının miktarında artış görülmektedir (Şekil 3.4(a)). Şekil 3.4(b) incelendiğinde harici alan değeri arttıkça dolaşıklığın üst sınırı azalmaktadır. Alt sınır artan manyetik alan değeriyle artmaktadır.



Şekil 3.4. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

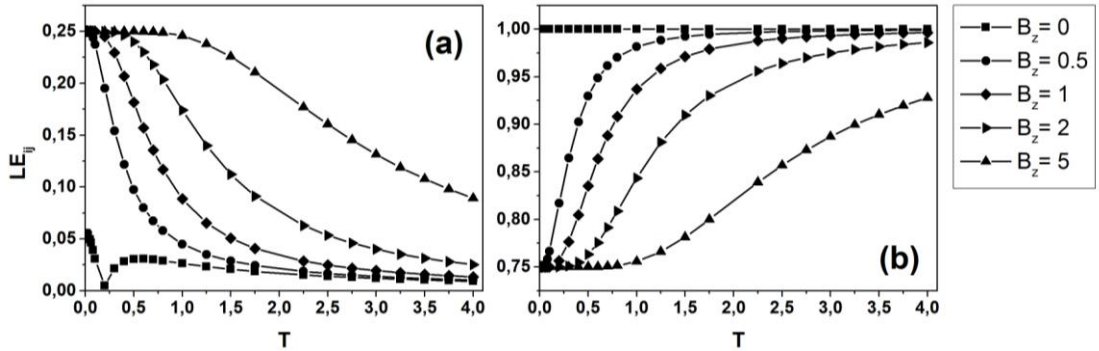
M.C. Arnesen, dipol-dipol etkileşmesi dahil edilmemiş ($D=0$) Heisenberg kuantum spin modellerinde harici alan ile birlikte dolaşıklığın artırılabilirliğini göstermiştir. Ayrıca yüksek harici alanlar dolaşık olmayan spinlerin dolaşık hale gelebileceğini de aynı çalışmada belirtmiştir (Arnesen ve ark., 2001). Dipol-dipol etkileşmesi dahil edilmemiş Heisenberg modelinde anizotropik ferromanyetik sistemde harici alan arttıkça düşük sıcaklıklarda dolaşıklığın üst sınırının aldığı değerler azalmaktadır. Sıcaklık arttıkça tüm harici alanlar için artma eğilimi göstermekte ve çoğu alan değeri ile kesişmektedir. Yüksek alanlar altında bu kesişme gerçekleşmemektedir. Alt sınır için de harici alana bağlı değişiklik üst sınırdaki davranışın aksi şeklindedir. İzotropik ferromanyetik model için her alan değerinde ve alanın yokluğunda dolaşıklığın alt sınırı, sıcaklık arttıkça azalmaktadır. Bununla birlikte uygulanan harici alan arttıkça dolaşıklığın alt sınırı, düşük sıcaklıklarda artmaktadır. Bu sonuçlar (Petros Androvitsaneas, Paspalakis, & Terzis, 2012) ile tutarlılık göstermektedir.

Tez çalışmasının bu kısmına kadar sadece dipol-dipol etkileşmesinin yokluğunda ($D=0$) yapılan ölçümler sunulmuştur. Bu ölçümler, daha önce sunulmuş çalışmalar ile karşılaştırılmıştır. Bu bilgiler ışığında önerilen model ve analitik sonuçların, simülasyon sonuçları ile birlikte literatür ile uyumlu olduğu gözlenmiştir. Dipol-dipol etkileşmesi hesaba katıldığında ferromanyetik XXX modeli için harici manyetik alan altında dolaşıklığın nasıl etkilendiği üzerinde durulacaktır. Dipol-dipol etkileşmesinin gücünü belirleyen dipol-dipol sabiti D 'nin bazı değerleri ($D= 0.25, 0.5, 0.75, 1, 2$ ve 4) için alınan ölçümler ve yapılan hesaplamalar değerlendirilerek bu etkinin dolaşıklığın sınırlarına etkisi aydınlatılacaktır. Şekil 3.5, Şekil 3.6, Şekil 3.7, Şekil 3.8, Şekil 3.9 ve Şekil 3.10 ile sırasıyla D 'nin aldığı $0.25, 0.5, 0.75, 1, 2$ ve 4 değerlerli için lokalize dolaşıklığın sınırları gösterilmiştir.

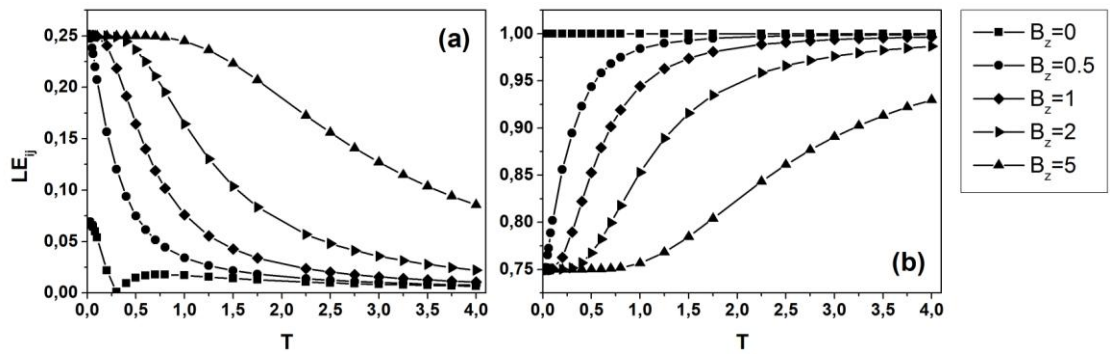


Şekil 3.5. $D=0.25$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

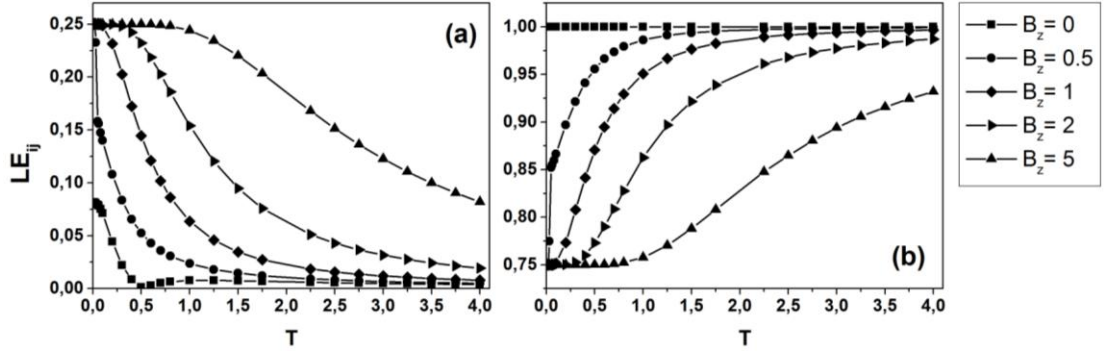
Dipol-dipol etkileşmesinin hesaba katılması ile birlikte özellikle $D=0.25, 0.5, 0.75$ ve $D=1$ dipol sabitleri için harici alanın yokluğunda elde edilen alt sınır değerleri incelendiğinde (Şekil 3.5, Şekil 3.6, Şekil 3.7 ve Şekil 3.8) dolaşıklığın sırasıyla $T \approx 0.1$, $T \approx 0.2$, $T \approx 0.3$ ve $T \approx 0.5$ değerlerinde $LE_{ij}^{lb} \approx 0$ değerine yaklaştığı görülmektedir. Bu kritik sıcaklık değerlerindeki davranışa, anizotropik XY Heisenberg modelinde termal dolaşıklık üzerine yapılan çalışmada rastlanmıştır (Zhou, Song, Guo, & Li, 2003).



Şekil 3.6. $D=0.5$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

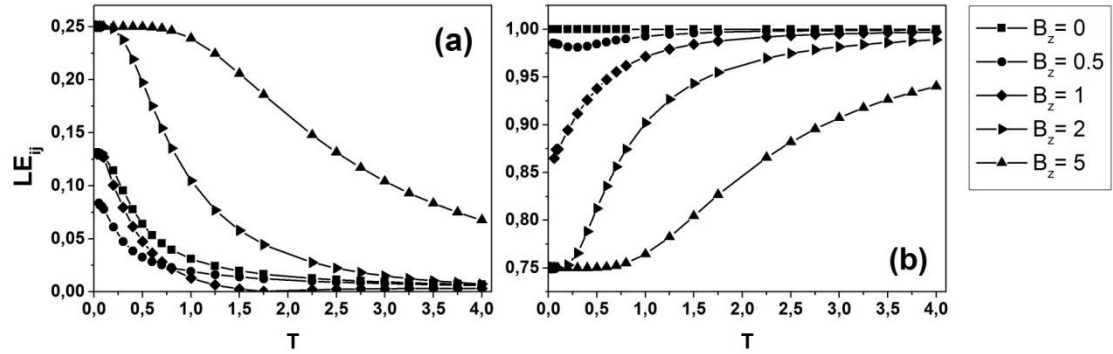


Şekil 3.7. $D=0.75$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı



Şekil 3.8. $D=1$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

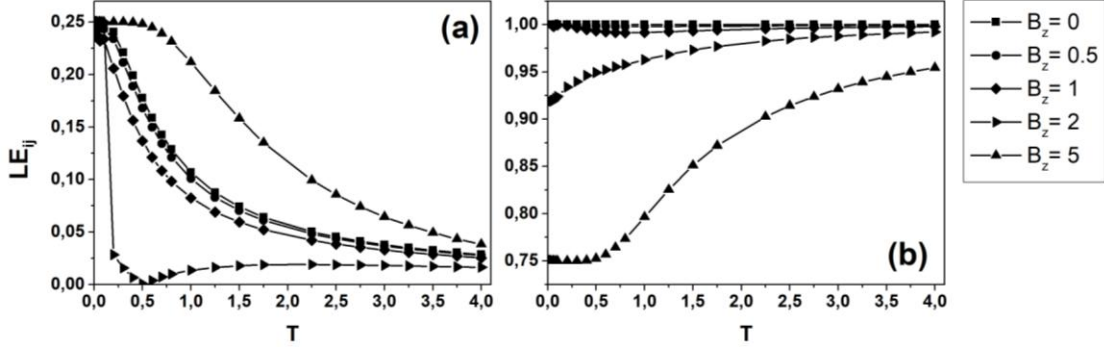
$D=1$ değeri için dolaşıklığın alt sınırı ve üst sınırındaki sıcaklığa göre değişimdeki davranışın ve düşük sıcaklıklardaki maksimum değerler önemli ölçüde değişiklik göstermemektedir. Dipol-dipol etkileşmesi, Zeeman etkileşmesi ve takas etkileşmesi yanında bahsi geçen D değerleri için zayıf kalmaktadır. $D>1$ için sistemdeki dipol-dipol etkileşmesinin sistemdeki etkisini arttırdığı Şekil 3.9 ve Şekil 3.10 incelenerek anlaşılabilir.



Şekil 3.9. $D=2$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

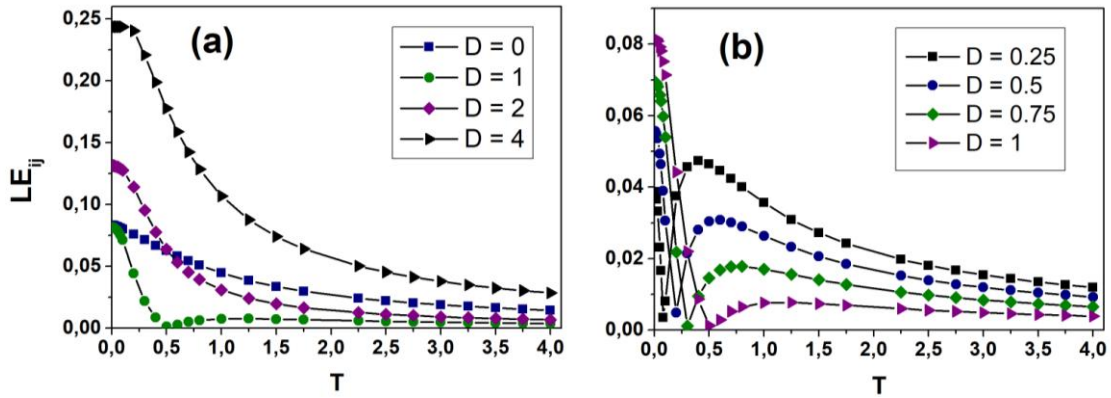
$B_z \geq 2$ için dolaşıklığın alt ve üst sınırlarının davranışı, diğer dipol sabitlerindeki davranışlarına benzer niteliktedir. $B_z = 1$ ve $B_z = 0.5$ harici alanları altında alt sınır harici alan değeri arttıkça azalmakta $B_z \geq 2$ halinde alt sınır artmaktadır. Düşük alan değerleri Zeeman etkileşmesini dipol-dipol etkileşmesinin yanında daha etkisiz kılmakta iken alan $B_z \geq 2$ halinde dipol-dipol etkileşmesini baskılamaya başlamaktadır.

Üst sınır için davranış diğer D değerleri ile karşılaştırıldığında benzerlik göstermektedir. Fakat düşük harici alan değerleri için harici alanın varlığı ile yokluğu arasında büyük farklar yoktur: Zeeman etkileşmesinin sistem üzerinde hükmü yok gibidir.



Şekil 3.10. $D=4$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

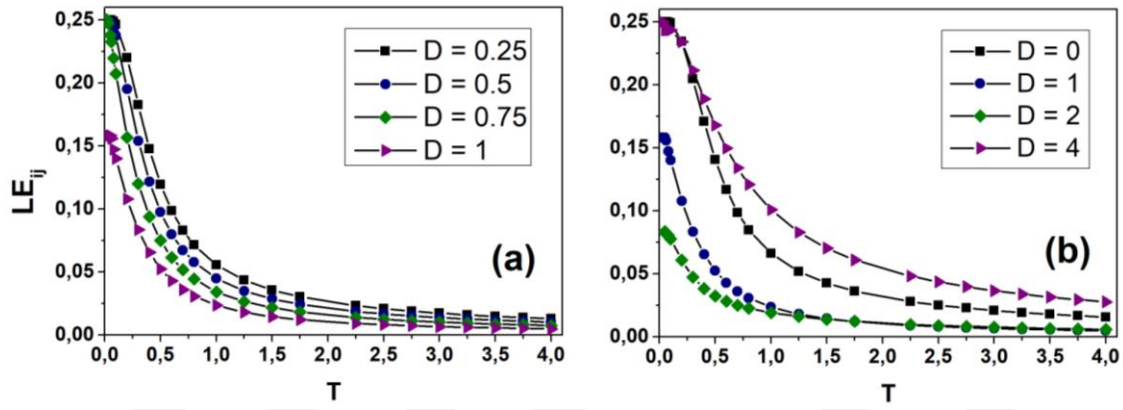
$D=4$ değeri için $D=2$ 'deki davranış gözlenmiştir. Alt sınır incelendiğinde, $B_z < 5$ alan değerleri için dolaşıklık artış göstermiş olmakal beraber, koşula uyan tüm alanlar için birbirine çok yakın değerler almıştır. Bununla birlikte $B_z = 2$ ve $T \approx 0.2$ 'de kritik bir nokta bulunmaktadır. Dolaşıklığın alt sınırının bu sıcaklık değerindeki miktarında ani bir azalma söz konusudur.



Şekil 3.11. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D = 0, 1, 2, 4$ (b) $D = 0.25, 0.5, 0.75, 1$

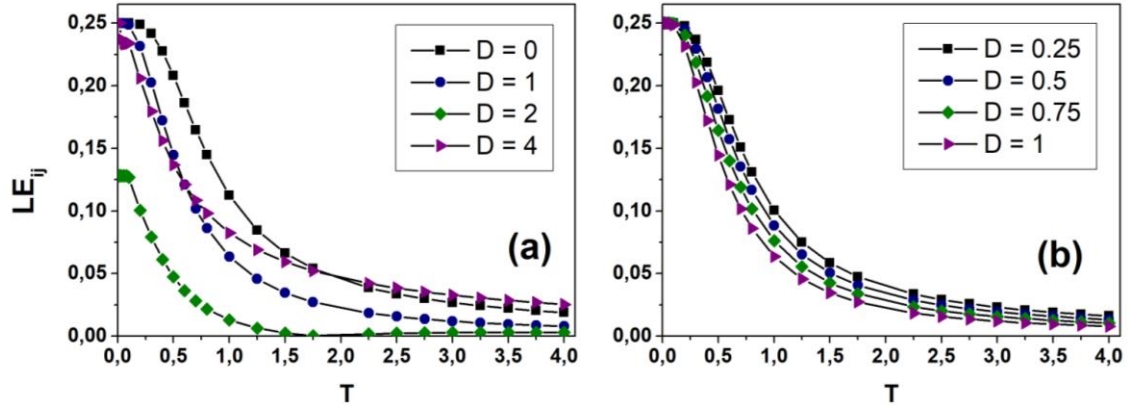
Şekil 3.11(a) incelendiğinde harici manyetik alanın yokluğunda sistemde dipol-dipol etkileşmesinin katkısı arttıkça dolaşıklığın alt sınırı $D = 1$ değerine kadar azalmakta; $D > 1$ için artmaktadır. Şekil 3.11(b) de belli sıcaklık değerlerinde sistemin

sönümlenmesi ve tekrar dolaşıklığın yaratılması uyanış fenomeni olarak adlandırılır. Harici alan $B_z = 0.5$ değerinde ise düşük sıcaklıklarda $D=0$ ve $D=4$ eğrileri neredeyse örtüşmektedir. Artan sıcaklığa bağlı olarak alt sınırın aldığı değerler azalmaktadır. $2 \geq D > 0$ değerleri için D arttıkça dolaşıklığın alt sınırı azalma göstermekte iken $D > 2$ için tekrar artmaktadır. Dipol-dipol etkileşmesinin varlığı diğer sabitlerle kıyaslanabilir büyüklükteki değerlere sahip iken D , dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerleri azaltmaktadır. Baskın D değerleri ($D=4$) için dipol-dipol etkileşmesi düşük sıcaklıklarda etkisiz kalmakta iken sıcaklık arttıkça yine sıcaklığa göre alt sınır değerlerini azaltırken $D=0$ daki aldığı değerlere göre dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerleri arttırmıştır.



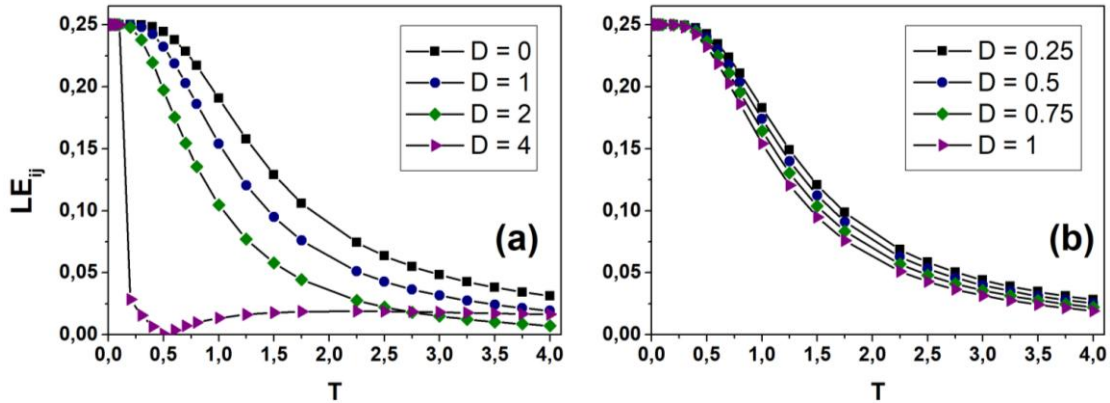
Şekil 3.12. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$ (b) $D=0, 1, 2, 4$

$B_z = 1$ harici alanı altında alt sınır $B_z = 0$ değeri için benzer bir davranış göstermektedir. Tek fark $D=4$ değerinde sistemin davranışı $D=1$ değerine benzerdir (Şekil 3.13). $B_z > 1$ için sistemin dipol-dipol etkileşmesinin gücüne göre değişimi (D) diğer alan değerlerindeki davranışa göre farklılık göstermeye başladığı değerlere tekabül etmektedir. Yüksek harici alanlar altında D arttıkça alt sınır doğrusal olarak azalmakta iken artan sıcaklık ile ilişkili davranışını da korumaktadır.



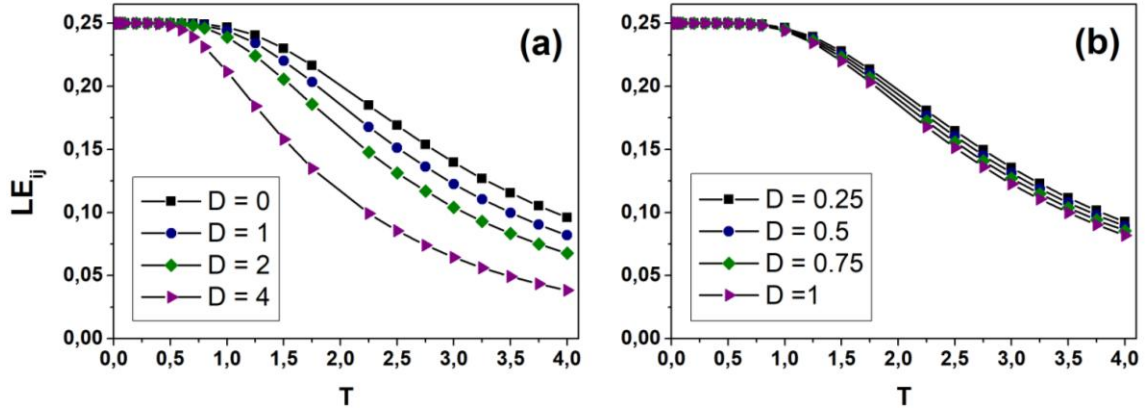
Şekil 3.13. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$

$T \approx 0.2$ değerindeki $D=4$ ve $B_z = 2$ 'de alt sınırın ani düşüşü ve beraberinde $T \approx 0.5$ değerinde tamamen sönümlenmesi ve bu değerden sonra alt sınırın artan sıcaklıkla azalmaması dipol-dipol etkileşmesinin bu harici alan altında monoton olduğu anlamına gelmektedir.



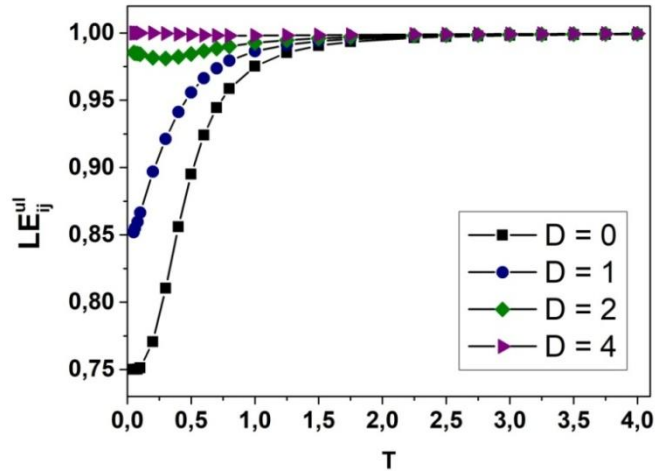
Şekil 3.14. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$

$B_z = 5$ harici alanı alındaki davranış bir önceki alan değeriyle benzerdir. Fakat bu alan değeri diğer tüm etkileşmeleri baskılamış ve etkisinin kaybetmesini sağlamıştır. Zeeman etkisi arttıkça zaten mümkün olduğunca düzenli spin yönelimine sahip ferromanyetik modelde dipol-dipol etkileşmesinin gücü hayli zayıflamakta olsa da varlığını Şekil 3.15(a)'da gösterildiği gibi korumaktadır.

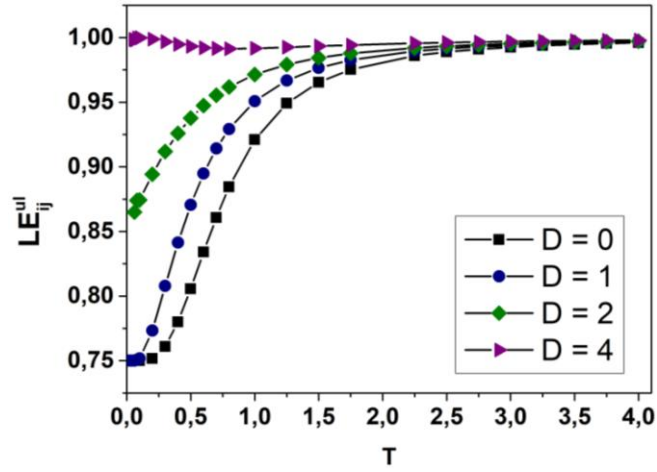


Şekil 3.15. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$

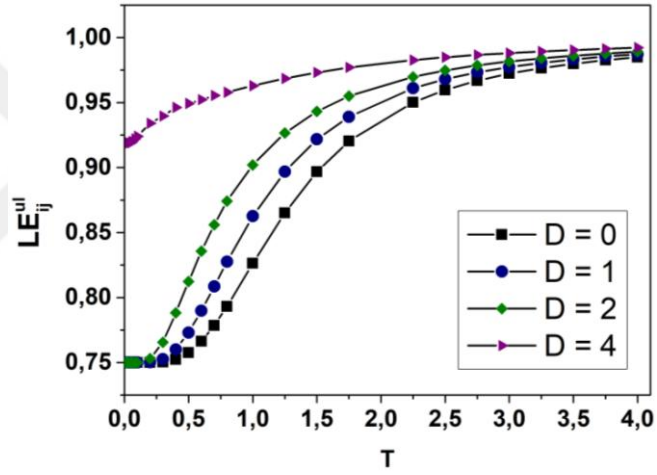
$B_z = 0.5$ harici alan altında dolaşıklığın üst sınırı için Şekil 3.16'dan hareketle dipol-dipol etkileşmesinin gücü arttıkça $T < 2$ değerlerinde dolaşıklığın arttığı ve $T \geq 2$ değerlerinde ise maksimum değerini alarak değişmediği anlaşılmaktadır. Bu davranış diğer alan değerler için değişmemekle birlikte harici alan değeri arttıkça dolaşıklığın maksimum değerini aldığı T sıcaklık değeri değişmektedir. Fakat $B_z = 2$ ve $B_z = 5$ harici alanlarında dolaşıklığın aldığı maksimum değer hayli azalmakta ve dipol-dipol etkileşmesi etkisiz hale gelmeye başlamaktadır.



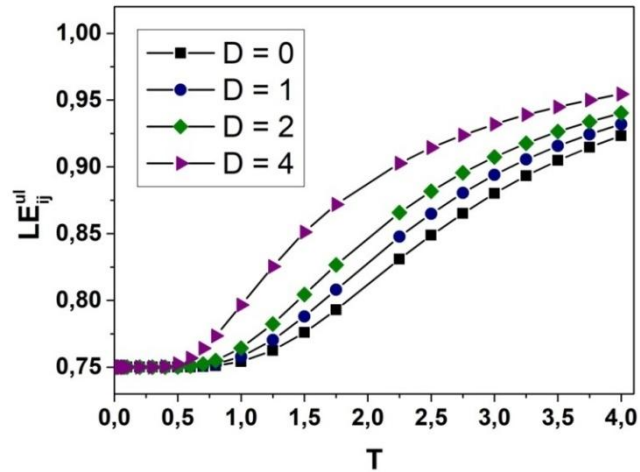
Şekil 3.16. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı



Şekil 3.17. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

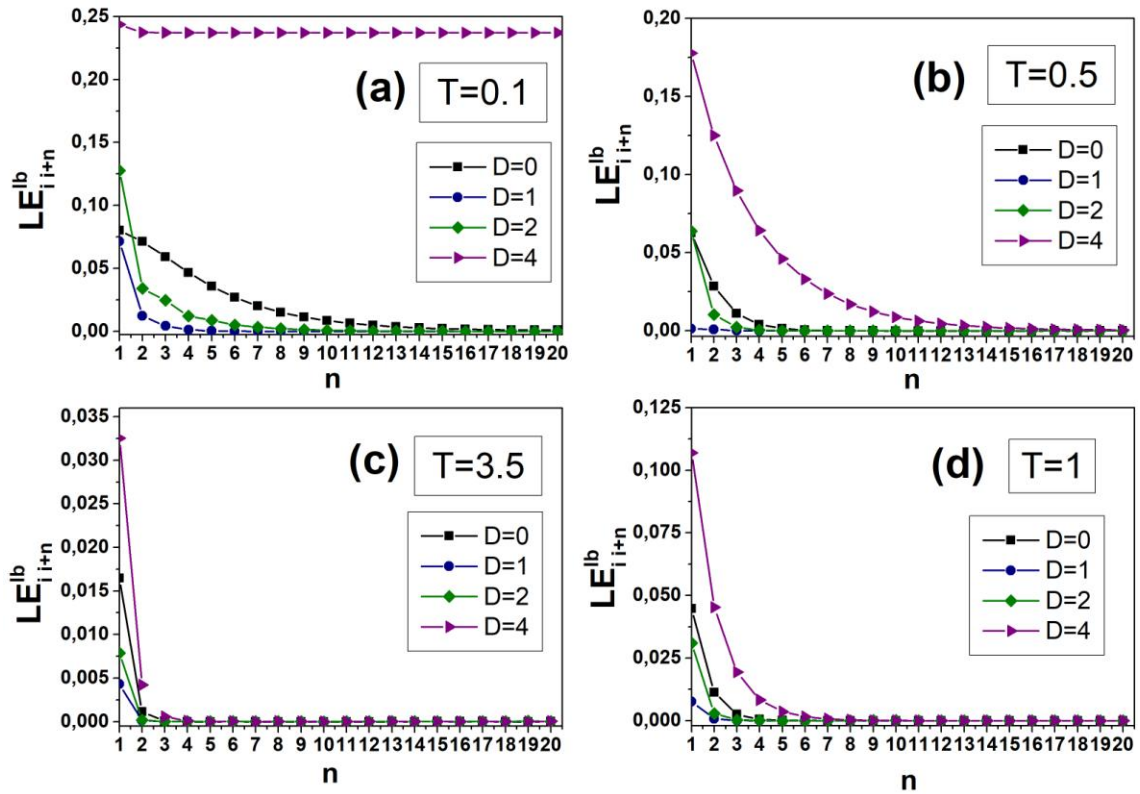


Şekil 3.18. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı



Şekil 3.19. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

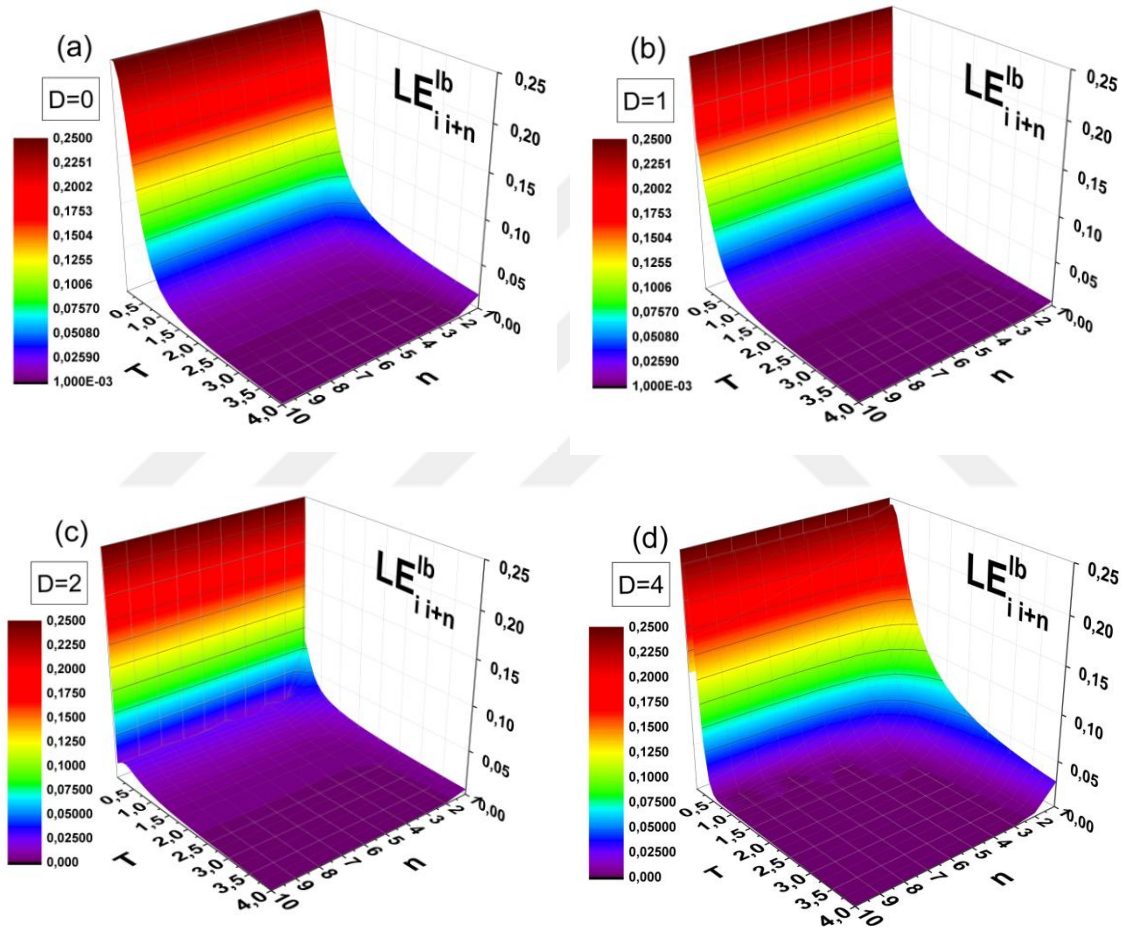
Şekil 3.16, Şekil 3.17, Şekil 3.18 ve Şekil 3.19 incelendiğinde bütün dipol-dipol sabitleri için dolaşıklığın üst sınırının aldığı değerlerin artan harici manyetik alanlar ile beraber azaldığı anlaşılmaktadır. Şimdiye yapılan bu değerlendirmeler dipol-dipol etkileşmesinin belirli harici alanlar altında ve alan yokluğunda kadar en yakın komşular için yapılmıştır.



Şekil 3.20. En yakın 20 komşu ve $B_z=0$ için dolaşıklığın alt sınırı (a) $T=0.1$ (b) $T=0.5$ (c) $T=3.5$ (d) $T=1$

Dipol-dipol etkileşmesinin dahil edildiği bu tez çalışmasında dolaşıklığın sistemdeki diğer spinler üzerindeki etkisini tartışmak için ilk 20 spin değerlendirmeye alınmıştır. Ferromanyetik XXX modeli için $B_z=0$ 'da, $T=0.05, 0.1, 0.5, 1, 3.5$ sıcaklıklarında $D=0, 1, 2$ ve 4 için dolaşıklığın alt sınırının n . en yakın komşu spinlere göre davranışı Şekil 3.20 ile verilmektedir. $T=0.1$ çok düşük sıcaklık değerinde $D=4$ için dolaşıklığın alt sınırı en yakın 20 komşu spin için incelendiğinde dolaşıklığın miktarında bir değişiklik olmadığı görülmektedir (Şekil 3.20(a)).

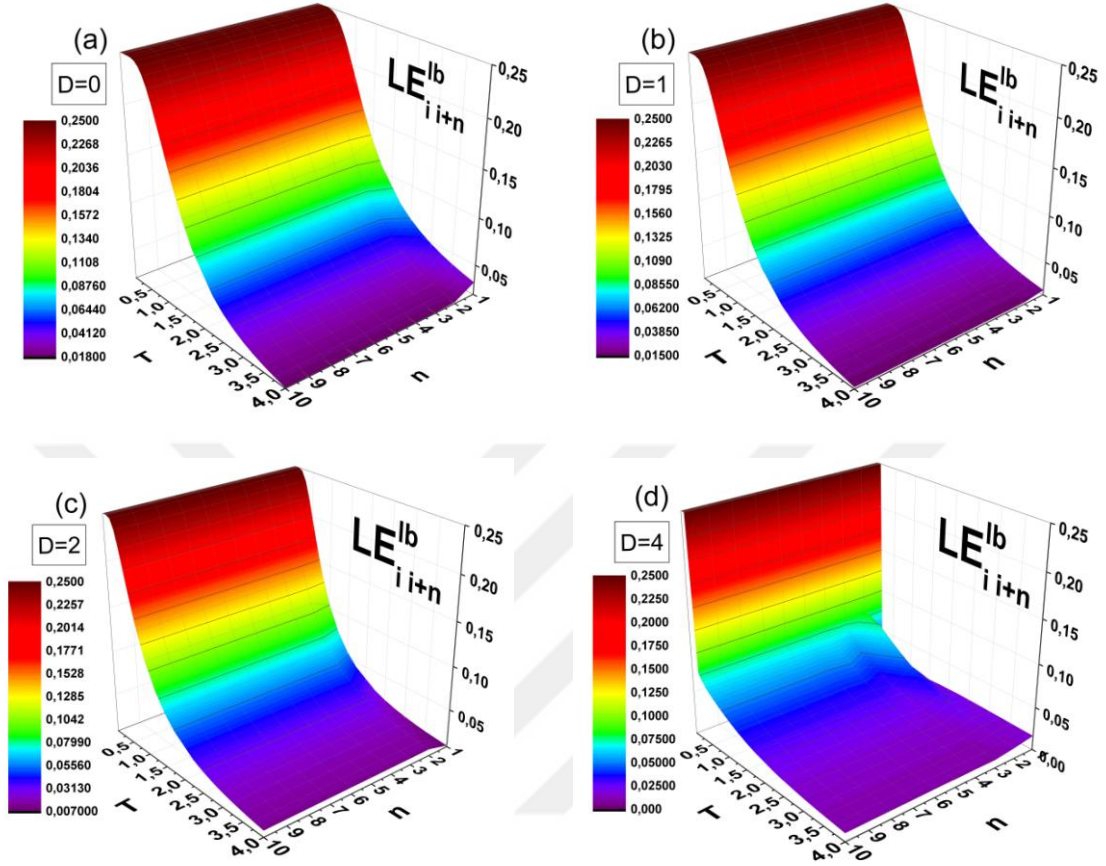
$D < 4$ için 9.ncu komşudan itibaren alt sınır sıfıra çok yakın değerler almaktadır. Ayrıca D değeri arttıkça uzak dolaşık çiftlerin sayısı azalmaktadır. $T=0.5$ için $n > 4$, $T=1$ 'de $n > 5$ ve $T=3.5$ 'da $n > 1$ için dolaşıklığın alt sınırı neredeyse sıfıra yaklaşmaktadır. Ayrıca $T=0.5$ 'de $D=4$ değerinde alt sınır $n > 11$ 'den sonra sıfıra yaklaşmaktadır. Harici alanın yokluğunda dolaşıklığın alt sınırının en yakın 20 komşu spine göre davranışı gösterilmiştir. $1 > D > 0$ aralığında artan D değerleri için dolaşıklık miktarı azalmakta iken $4 > D > 1$ aralığında artan D değerleri için dolaşıklığın miktarı artmaktadır. Bu davranış tüm sıcaklık değerleri için geçerlidir.



Şekil 3.21. $B_z=0.5$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi

Harici manyetik alan $B_z=0.5$ altında n . komşu sayısına göre dolaşıklığın alt sınırının sıcaklıkla değişimi $D=0, 1, 2$ ve 4 için sırasıyla Şekil 3.21 ile verilmektedir. $D < 4$ için sıcaklığa bağlı alt sınırın azalması monotondur. $D=4$ için yüksek sıcaklıklarda $n > 3$ için

alt sınır neredeyse sönümlenmiştir. Çok düşük sıcaklıklarda ise n arttıkça monoton bir azalma söz konusudur. $T \approx 1$ 'de tek-çit etkileri gözlenmektedir.

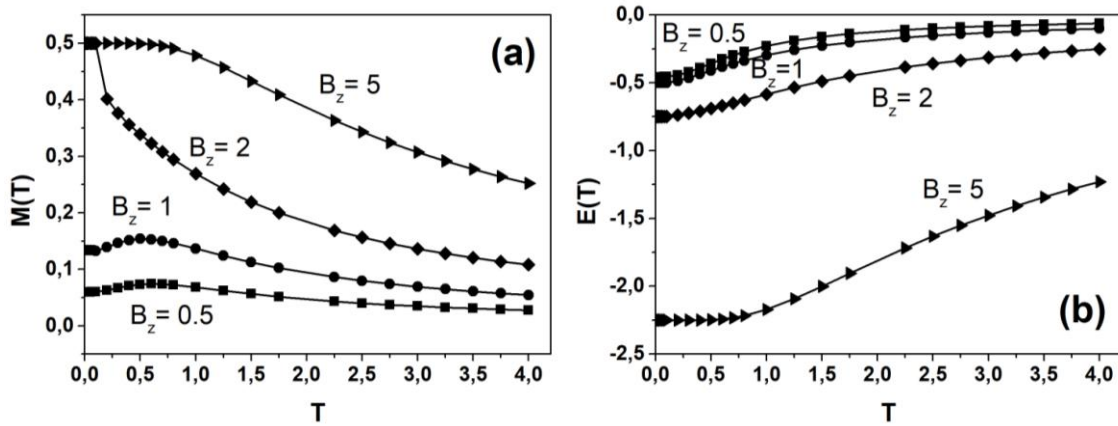


Şekil 3.22. $B_z=2$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi

Harici manyetik alan $B_z=2$ altında n . komşu sayısına göre dolaşıklığın alt sınırının sıcaklıkla değişimi $D=0, 1, 2$ ve 4 için sırasıyla Şekil 3.21 ile verilmektedir. $B_z=2$ için dipol-dipol etkileşmesinin yokluğunda ve $D=1$ 'de $n>2$ komşuluklarında yüksek sıcaklıklarda alt sınır sönümlenmektedir. Bu davranışın aksine $D=2$ ve $D=4$ 'te çok yüksek sıcaklıklarda dahi alt sınır küçük te olsa sıfırdan farklı değerler almaktadır. Düşük sıcaklarda $D<4$ için tüm komşu spinler için alt sınır büyük değişiklik göstermemektedir.

3.2.2. Anti Ferromanyetik XXX Modeli

Antiferromanyetik model için doğrudan lokalize dolaşıklığın alt ve üst sınırları harici alanın yokluğunda, ve bazı alan değerleri için belirlenmiştir. Şekil 3.23’de farklı harici alan değerleri sıcaklığa bağlı değişen mıknatıslanma ve enerji grafikleri bulunmaktadır. Dipol-dipol etkileşmesinin bulunmadığı durumda $B_z=0.5$ ve $B_z=1$ harici alan değerleri için düşük ve yüksek sıcaklıklarda spin başına mıknatıslanma önemli bir değişiklik göstermemiştir. Antiferromanyetik model ve sistemler için beklenmeyen bir sonuç değildir. Yüksek alan altında takas etkileşmesine baskın olan Zeeman enerjisi spin yönelimlerini alan yönünde olmaya zorlamakta ve çok düşük sıcaklıklarda sistemdeki mıknatıslanma ferromanyetik sistemdekine benzer bir davranış sergilemektedir. $B_z=2$ bu sistemde görece yüksek bir alan değeri olarak kabul edilmektedir. $B_z=5$ ise çok yüksek bir alandır ve alan sistemdeki tüm spinleri kendi doğrultusunda tutmak işinde büyük kararlık göstererek takas etkileşmesini ihmal edilebilir seviyeye çekmektedir. Sıcaklığın artması sistemde düzensiz bir yapıya olanak sağlıyor olsa da çok yüksek alanda bile yüksek sıcaklıklarda spin başına mıknatıslanma çok önemli bir azalma göstermemektedir.

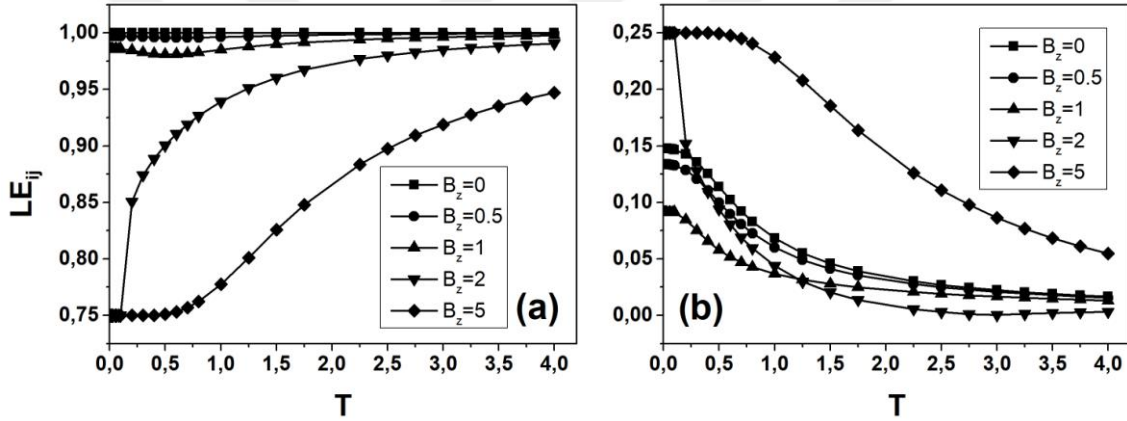


Şekil 3.23. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5$, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) spin başına mıknatıslanma (b) enerji yoğunluğu

Şekil 3.23(b) de $B_z=0.5$ ve $B_z=1$ alanlar uygulandığında enerjinin sıcaklıkla değişim karakteri ile beraber enerjinin sıcaklığa bağlı aldığı değerler birbirine yakındır. Dipol-dipol etkileşmesinin ihmal edildiği durumda dolaşıklığın üst sınırı, harici alan değeri

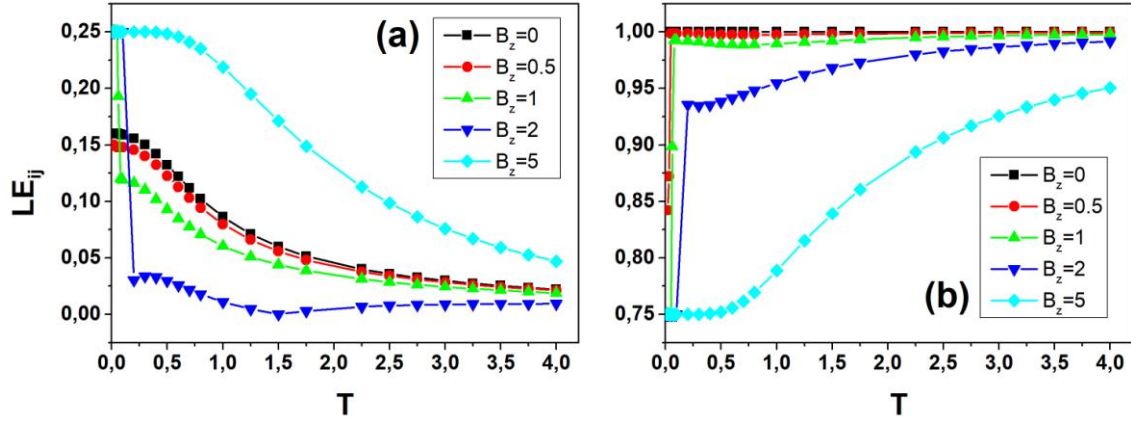
arttıkça azalmaktadır. $B_z < 2$ değerleri için maksimize olmakla beraber $B_z = 2$ için $T \approx 0.15$ 'de kritik bir artış göstererek artan sıcaklık ile üst diğer manyetik alan değerlerine yaklaşmaktadır. Harici alan $1 > B_z > 0$ aralığında arttıkça alt sınırın aldığı değerler azalmaktadır. Aksine $B_z > 1$ durumunda alan arttıkça alt sınır da artmaktadır. Alt sınırın sıcaklığa bağlı davranışı değişmemektedir. $B_z = 2$ harici alanı altında $T \approx 0.15$ 'de kritik sıcaklıkta dolaşıklığın alt sınırında ani bir düşüş meydana gelmektedir. Yüksek sıcaklıklarda ise alt sınır diğer alan değerlerine göre minimumdur.

Dipol-dipol etkileşmesinin dahil edilmediği antiferromanyetik XXX modelinde, anizotropinin lokalize dolaşıklığı arttırdığı sonucuna ulaşılmıştır. Harici alan arttıkça alt sınır değerleri artmakta ve üst sınırın aldığı değerler azalmaktadır (Jin & Korepin, 2004).



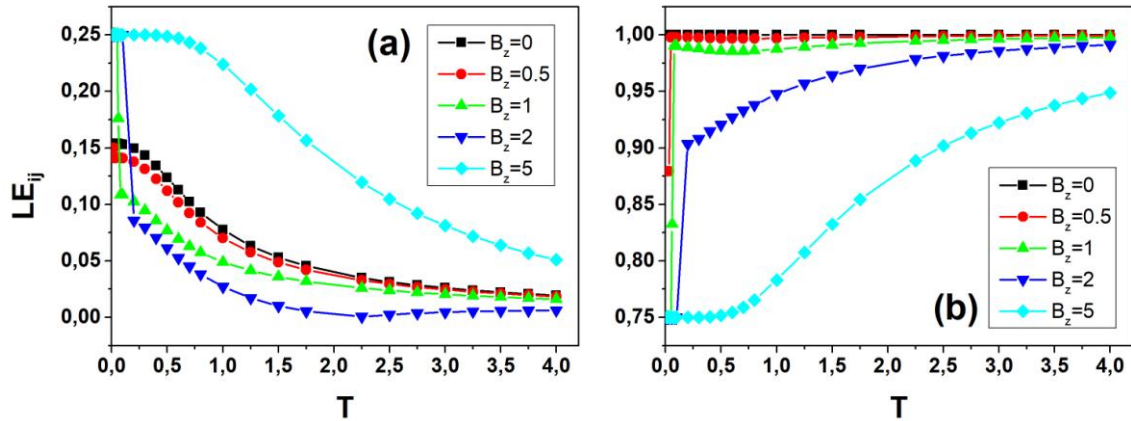
Şekil 3.24. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın üst sınırı (b) dolaşıklığın alt sınırı

$D < 4$ değerlerinde dolaşıklığın alt sınırının miktarı $B_z \leq 2$ harici alanları altında azalmaktadır. $B_z = 5$ yüksek alan altında ise bu miktar tekrar artış göstermektedir ve yüksek değerleri almaktadır. D arttıkça uygulanan harici alan değerleri ve alanın yokluğundaki alt sınırın sıcaklığa bağlı aldığı değerler birbirine yaklaşmaktadır. $D=4$ için alt sınırın sıcaklığa bağlı davranışı değişmez iken harici alan arttıkça dolaşıklık, D 'nin artışı ile ters orantılı olarak azalmaktadır (Şekil 3.30(a)).

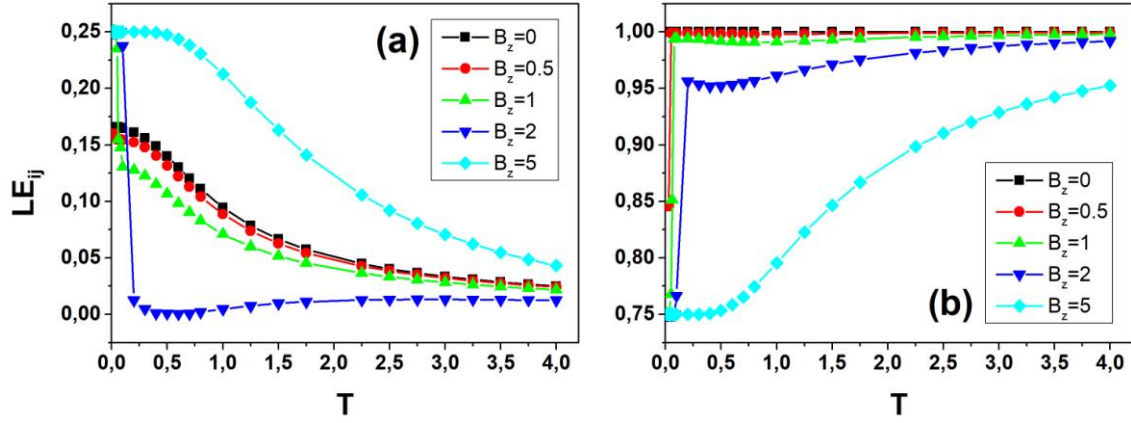


Şekil 3.25. $D=0.25$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

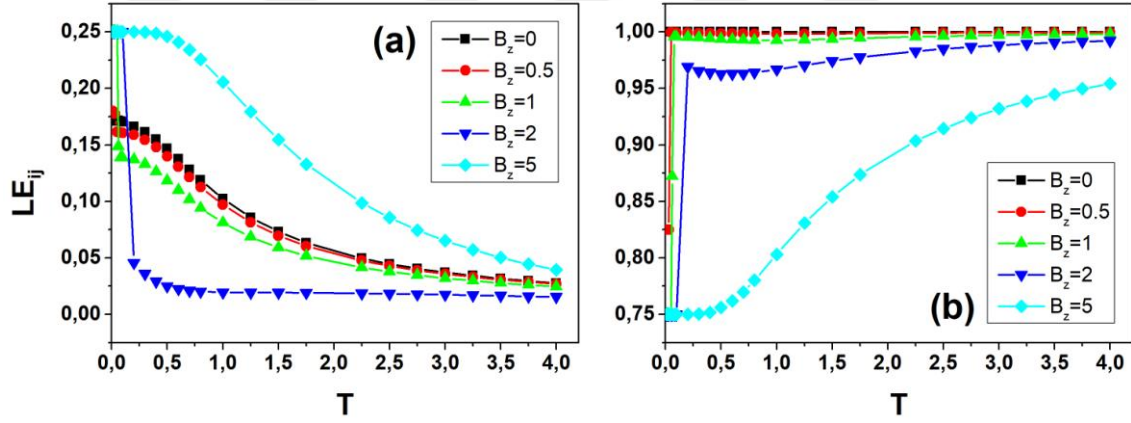
Üst sınırın davranışı incelendiğinde (Şekil 3.25(b), Şekil 3.26(b), Şekil (3.27(b)), Şekil (3.28(b)), Şekil (3.29(b)), Şekil (3.30(b))) dipol-dipol etkileşmesinin sisteme dahil edilmesiyle dolaşıklığın artan manyetik alan değerlerine göre davranışında değişiklik olmadığı görülmektedir. Her D değeri için harici alan arttıkça üst sınırın sıcaklığa bağlı aldığı değerler azalmakta ve yüksek sıcaklıklarda örtüşmeye başlamaktadır. Bununla birlikte D 'nin yüksek değerlerinde yüksek manyetik alan değeri $B_z=5$ hariç diğer alan değerleri için yapılan üst sınır değerleri birbirine yaklaşmakta ve maksimum değere ulaşmaktadır.



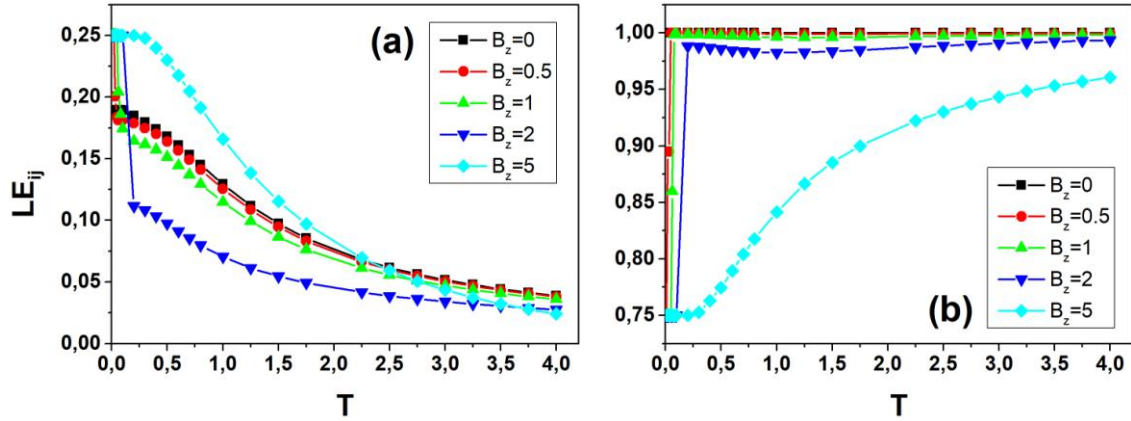
Şekil 3.26. $D=0.5$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı



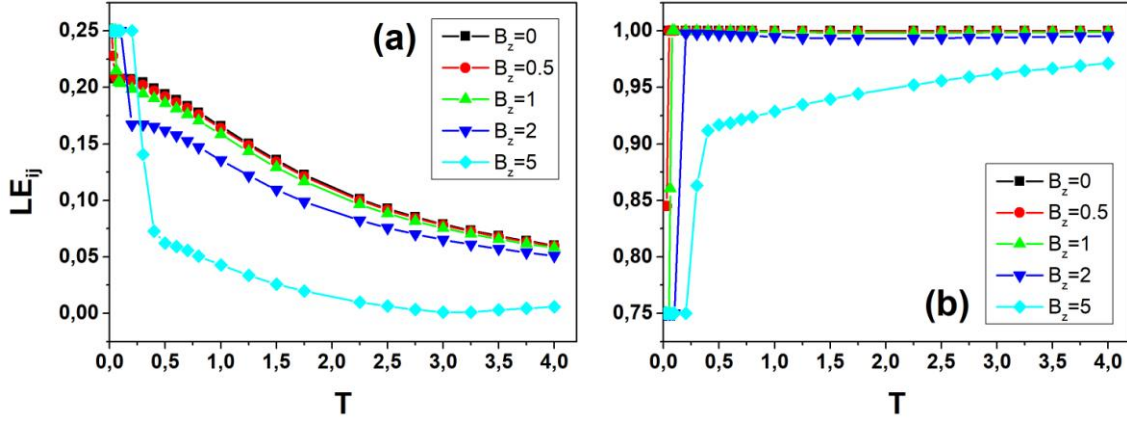
Şekil 3.27. $D=0.75$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı



Şekil 3.28. $D=1$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

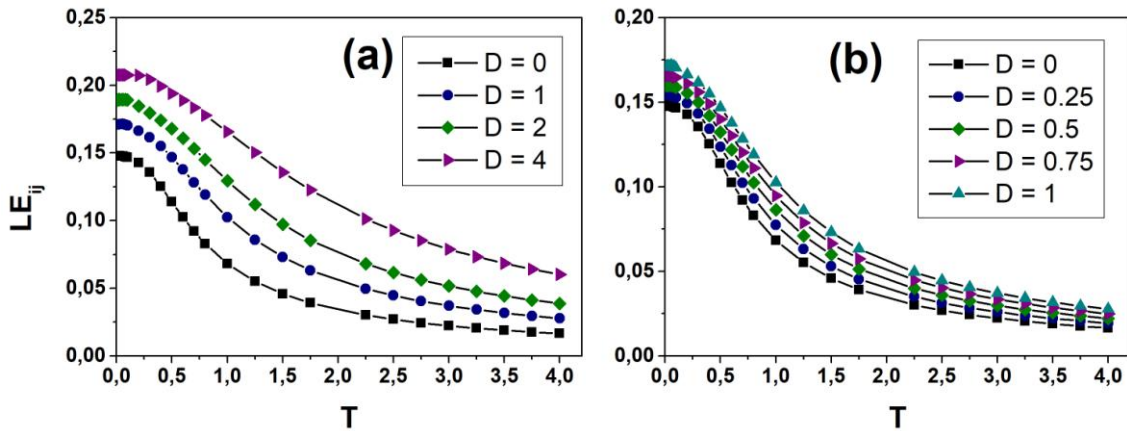


Şekil 3.29. $D=2$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

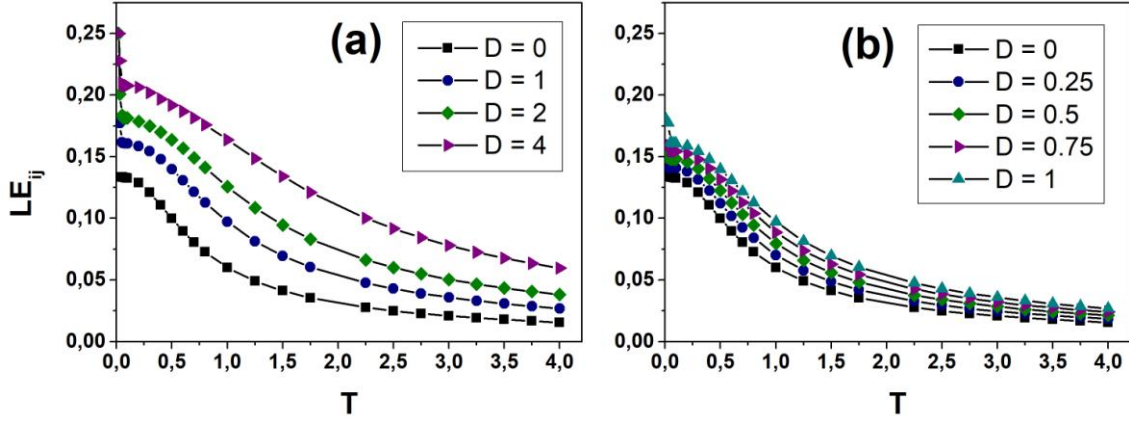


Şekil 3.30. $D=4$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

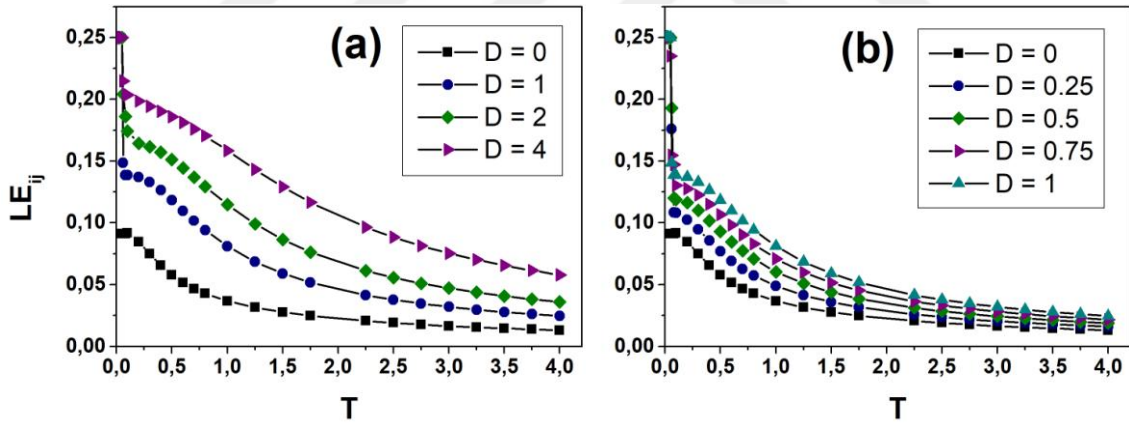
Şekil 3.31, Şekil 3.32 ve Şekil 3.33 değerlendirildiğinde $B_z < 2$ için D arttıkça dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerlerin arttığı anlaşılmaktadır. $B_z \geq 2$ için bu davranış değişiklik göstermektedir. Şekil 3.34(b) incelendiğinde $0.75 \geq D > 0$ aralığında D arttıkça alt sınırın aldığı değerler azalmakta iken $D=1$ değerinde dolaşıklığın miktarı $D=0.75$ 'ten daha fazladır. $D > 1$ değerleri için D arttıkça alt sınır da artmaktadır. $D=0$ için $T > 2$ sıcaklık değerlerinde dolaşıklığın alt sınırı sönümlenmektedir (Şekil 3.34(a)).



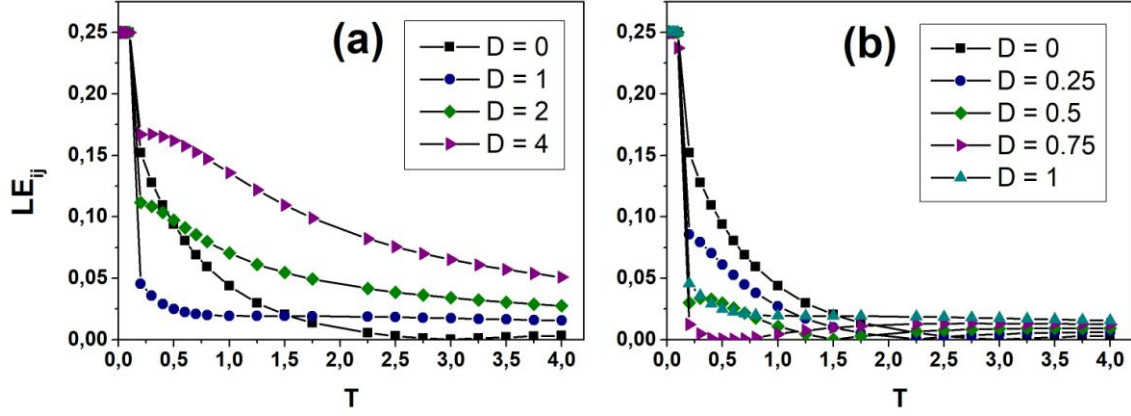
Şekil 3.31. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$



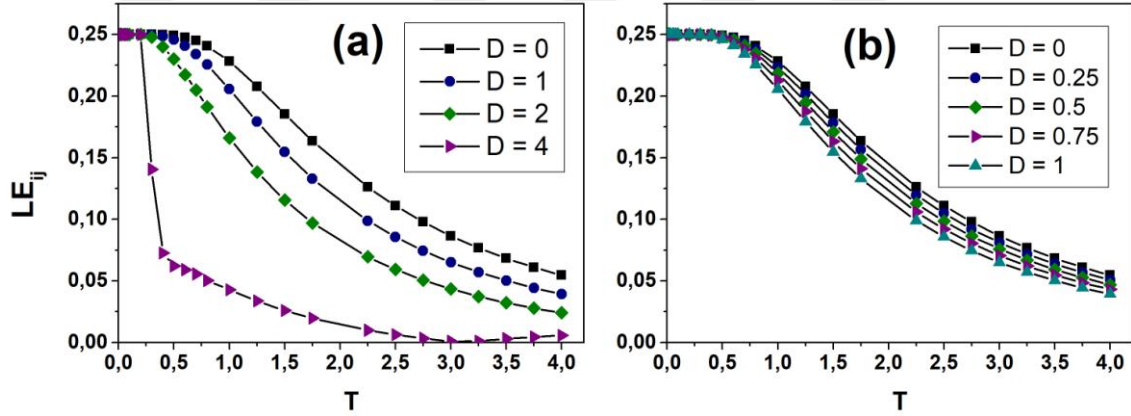
Şekil 3.32. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$



Şekil 3.33. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$

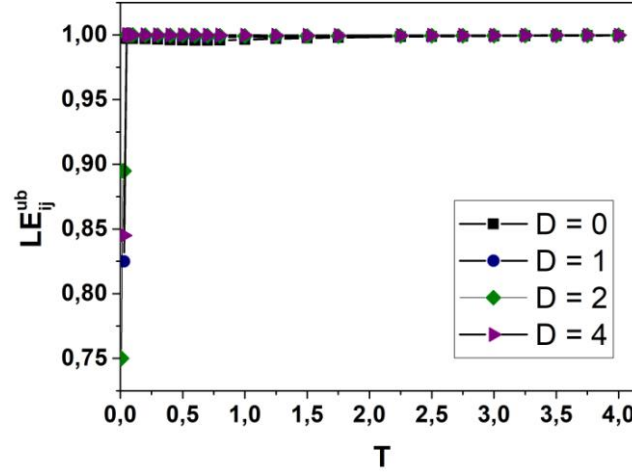


Şekil 3.34. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$



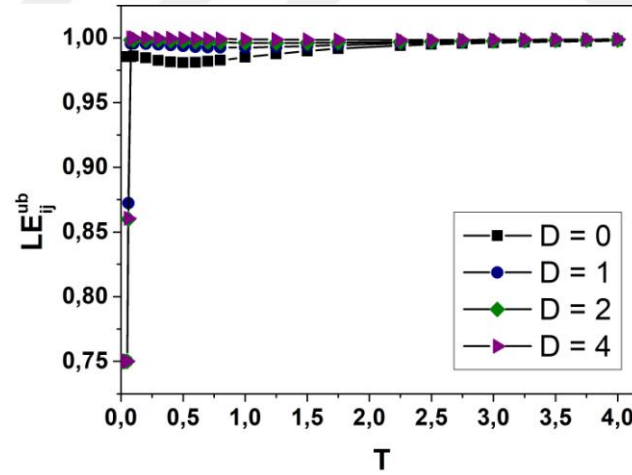
Şekil 3.35. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$

Yüksek harici alan $B_z=5$ altında ise alt sınır D arttıkça azalmaktadır ve $D=4$ için $T>2.5$ değeri için sönümlenmektedir. Antiferromanyetik XXX modelinde alt sınırın davranışı incelendikten sonra üst sınır için bir değerlendirme yapmak gerekmektedir. $B_z=0$ harici alan altında tüm D değerleri için üst sınırın sıcaklığa bağlı aldığı değerler üst üste binmektedir ve artan sıcaklığa bağlı olarak değişmediği anlaşılmaktadır. Bununla beraber maksimum değerini almaktadır.



Şekil 3.36. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

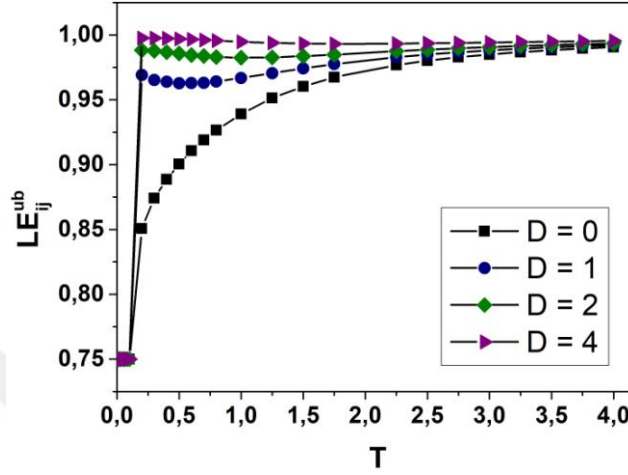
Çok düşük sıcaklıklarda üst sınır düşük değerler almakla birlikte $B_z > 1$ için dipol-dipol etkileşmesinin sistem üzerindeki etkisi görülmektedir. D değeri arttıkça üst sınır artış göstermektedir. Yüksek harici alan dipol-dipol etkileşmesinin gücünün zayıf olduğu durumlarda (D) üst sınırın aldığı değerleri azaltmaktadır. Sıcaklık arttıkça her D değeri ve tüm alanlar için üst sınırın aldığı değerleri arttırmaktadır.



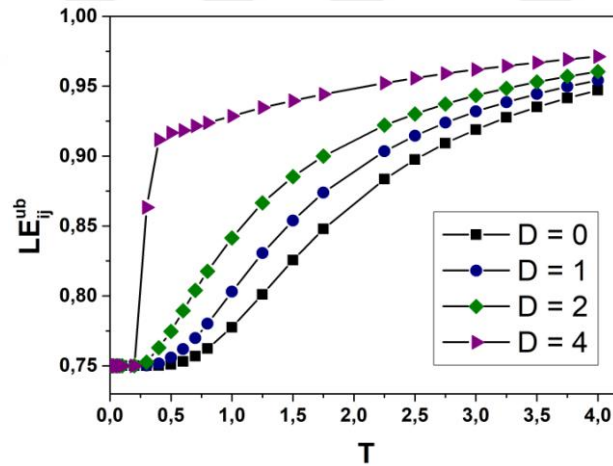
Şekil 3.37. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

En yakın komşu spinler arasında dolaşıklığın alt ve üst sınırlarının uygulanan harici alan ve dipol-dipol etkileşme sabiti D 'nin varlığında nasıl davrandığı incelendikten sonra diğer en yakın spinler arasındaki davranış araştırılmıştır. Dolaşık çiftlerin gücünün bu

etkileşmeler altında nasıl değiştiği ve en yakın n komşu spin üzerindeki etkisi güçlü dolaşık çiftlerin hangi koşullar altında elde edilebileceği ve dolaşıklığı kuantum işlemler için kaynak olarak kullanmak adı altında bu tez çalışmasının hedef aldığı önemli bir noktadır.



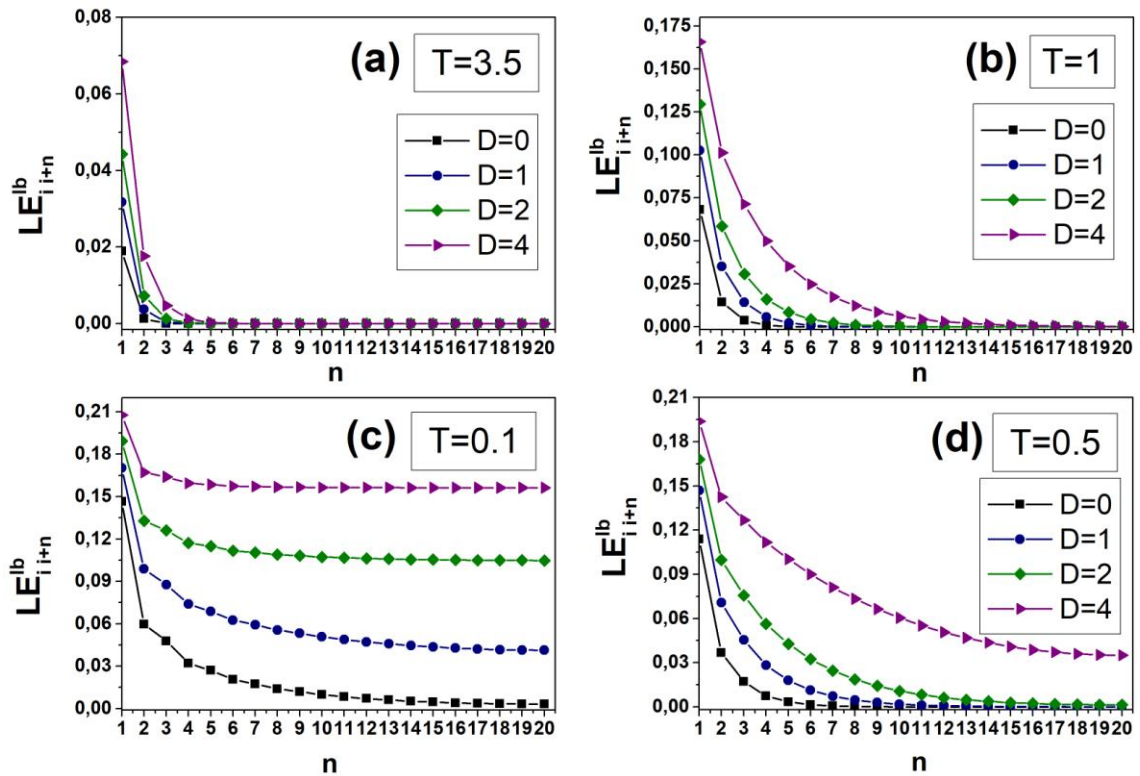
Şekil 3.38. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı



Şekil 3.39. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

Antiferromanyetik XXX modeli için $B_z=0$ 'da, $T=0,1, 0,5, 1, 3,5$ sıcaklıklarında $D=0, 1, 2$ ve 4 için dolaşıklığın alt sınırının n . en yakın komşu spinlere göre davranışı Şekil 3.40 ile verilmektedir. Harici alanın yokluğunda, çok düşük sıcaklıkta ($T=0,1$), D değeri arttıkça alt sınırın aldığı değerlerin arttığı aşikardır. $D=0$ 'da $n>14$ için alt sınır sönümlenmektedir. Diğer dipol-dipol sabitleri için alt sınırın aldığı değerler

sönümlenmemekle birlikte $D=2$ 'de $n>6$ ve $D=4$ 'de $n>4$ için alt sınır n arttıkça değişmemektedir. Bununla birlikte tüm sıcaklık değerleri için geçerli olan bir durum ise spinler uzaklaştıkça dolaşıklığın azaldığıdır. Sıcaklığın bozucu etkisi $T=0.5$ sıcaklık değerinde (Şekil 3.40(d)) fark edilmektedir. Yine de burada $D=4$ (güçlü dipol-dipol) sıcaklığın bozucu etkisinin önüne geçerek en yakın 20 komşu ile olan ikili dolaşıklığın sönümlenmesini engellemiştir. D değeri arttıkça dolaşık çiftlerin erimi de artmaktadır. $T=1$ 'de $n>10$ için alt sınır sönümlenmekle beraber dolaşıklığın miktarında azalma görülmektedir. Çok yüksek sıcaklıkta ise $n>4$ için dolaşık çiftler için alt sınırın aldığı değerler sönümlenmektedir. Harici alanın varlığında en yakın 10 komşu ($n=10$) için alt sınırın gösterdiği değişim incelenerek harici alan ve D 'nin etkisi incelenmiştir.

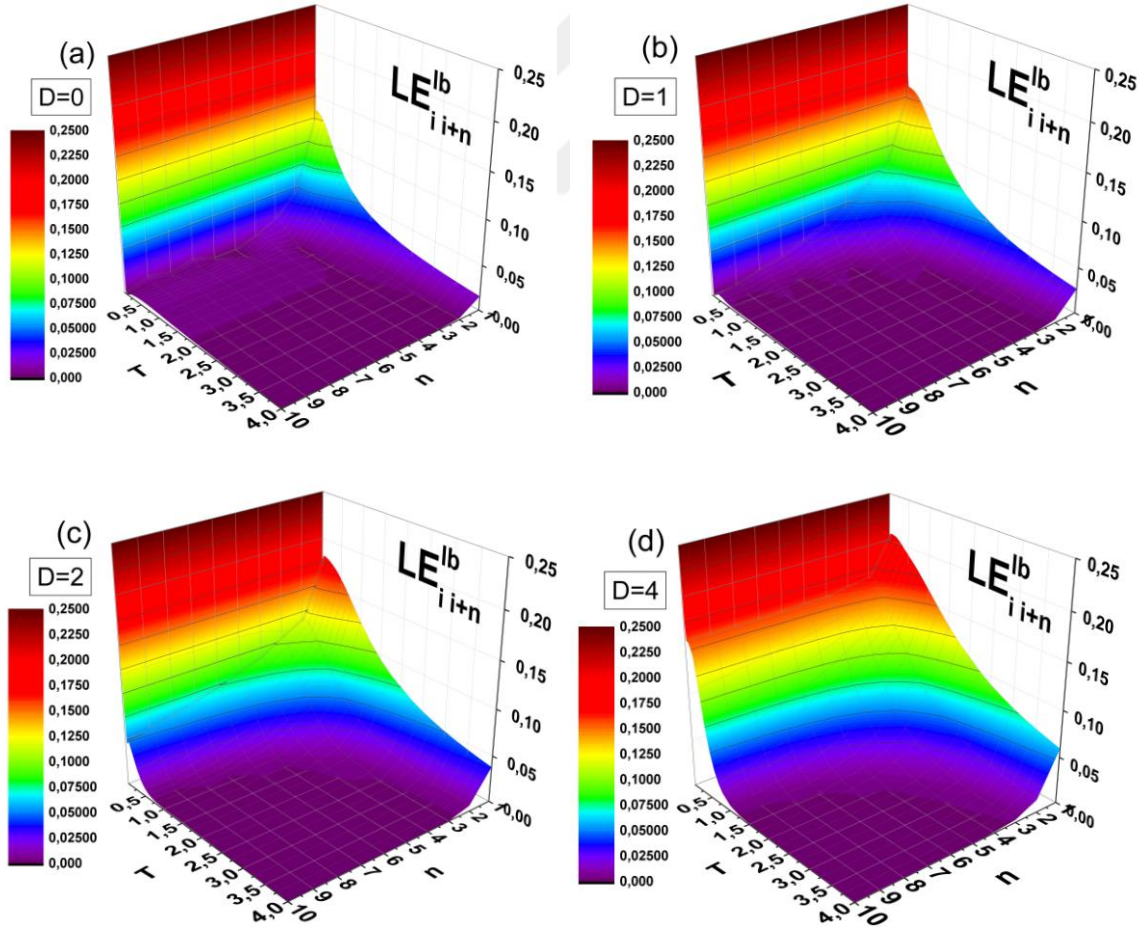


Şekil 3.40. En yakın 20 komşu ve $B_z=0$ için dolaşıklığın alt sınırı (a) $T=3.5$ (b) $T=1$ (c) $T=0.1$ (d) $T=0.5$

Antiferromanyetik anizotropik XYZ modeli için lokalize dolaşıklığın sınırlarının belirlendiği bir çalışmada, takas sabitleri J_x , J_y ve J_z 'nin birbirine çok yakın değerler aldığı durumda harici alanın yokluğunda düşük sıcaklıklarda spin uzaklığı değiştikçe periyodik olarak dolaşıklığın sönümlendiği ve tekrar ortaya çıktığı fark edilmiştir. Buna tek-çift etkisi denmektedir (Petros Androvitsaneas, Terzis, & Paspalakis, 2013).

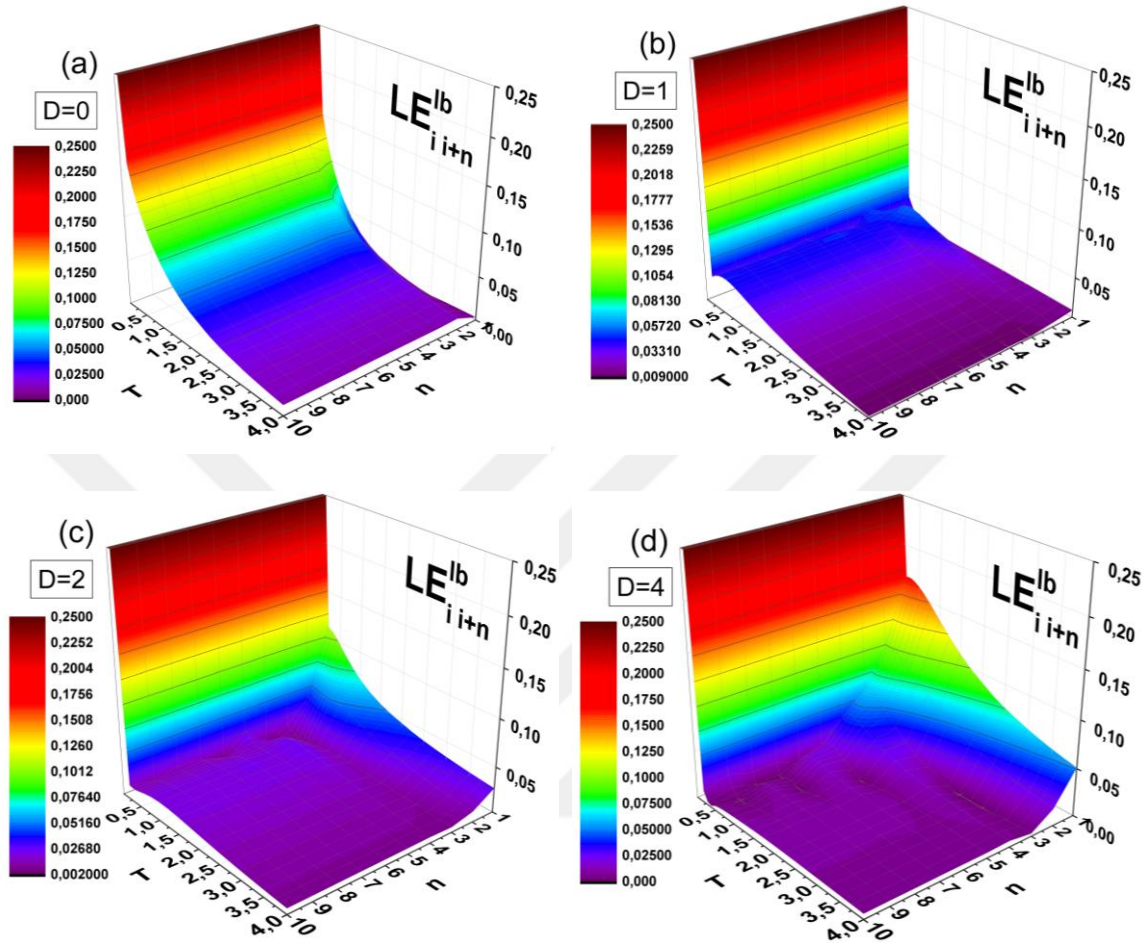
İzotropiye bağlı bu etki bu tez çalışmasında harici alanın varlığında bazı dipol sabitlerinin aldığı değerler için gözlenmiştir.

Harici manyetik alan $B_z=0.5$ altında n . komşu sayısına göre dolaşıklığın alt sınırının sıcaklıkla değişimi $D=0, 1, 2$ ve 4 için sırasıyla Şekil 3.41 ile verilmektedir. $B_z=0.5$ ve $D=1$ değerinde $1.5 > T > 0.5$ aralığında $n > 3$ için tek-çift etkisi gözlenmektedir. Ayrıca aynı harici alan değeri altında D arttıkça dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerlerde özellikle daha uzak komşu spinler için arttığı gözlenmektedir. $D=4$ için komşu çok düşük sıcaklıklarda komşu uzaklığına göre alt sınır değişmemektedir. $D=0$ için çok düşük sıcaklıkta $T \approx 0.1$ $n > 4$ için alt sınır sönümlenmekte ve $T \approx 2.7$ 'ye kadar tekrar yaratılmakta ve bu sıcaklık değerinden sonra tekrar sönümlenmektedir. Dolaşıklığın alt sınırında ise sıcaklığa bağlı davranışın monoton olmaması da $B_z=0.5$ ve $D=1$ 'da gözlenmiştir. Bu durum uyanış fenomeni olarak adlandırılır. Ayrıca $B_z=2$ için $D=2$ ve $D=4$ 'te açık bir şekilde belli olmaktadır.



Şekil 3.41. $B_z=0.5$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi

Harici manyetik alan $B_z=2$ altında n . komşu sayısına göre dolaşıklığın alt sınırının sıcaklıkla değişimi $D=0, 1, 2$ ve 4 için sırasıyla Şekil 3.42 ile verilmektedir.



Şekil 3.42. $B_z=2$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi

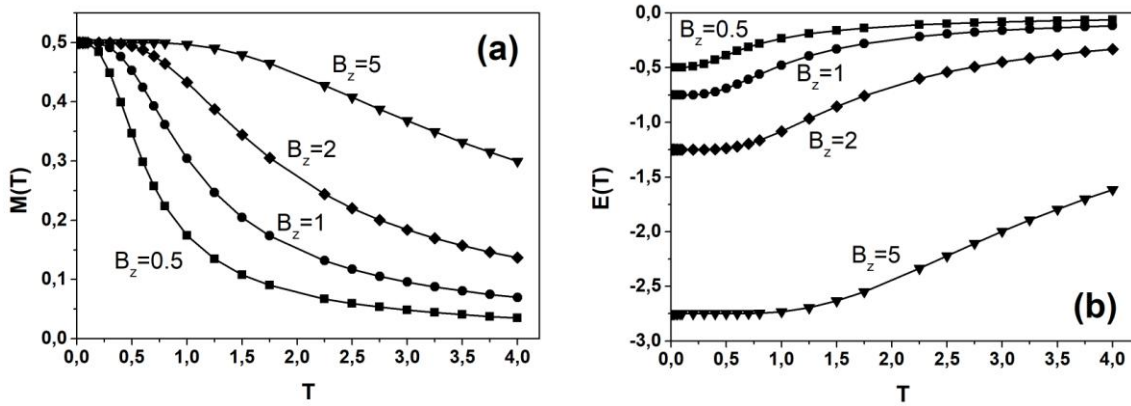
$B_z=2$ harici alanı altında D arttıkça tek-çift etkisi ve uyanış fenomeni aşıkardır. Ayrıca yüksek sıcaklıklarda dahi en yakın komşu spinlerin alt sınır değerleri en yüksektir.

3.3. Karışık Durumlar

Tez çalışmasının bu bölümünde karışık haller üzerinde durulmuştur. Bu bölüm iki bölümde incelenmiştir. İlki $-x$ ve $-y$ 'de antiferromanyetik ($J_x=J_y=-1$) ve $-z$ 'de antiferromanyetik ($J_z=1$) olan durum; ikincisi $-x$ ve $-y$ 'de ferromanyetik ($J_x=J_y=1$) ve $-z$ 'de ferromanyetik ($J_z=-1$) olan durum olarak parametrelendirilmiştir. Her durum için sıcaklığa göre dolaşıklığın alt ve üst sınırları incelenmiştir.

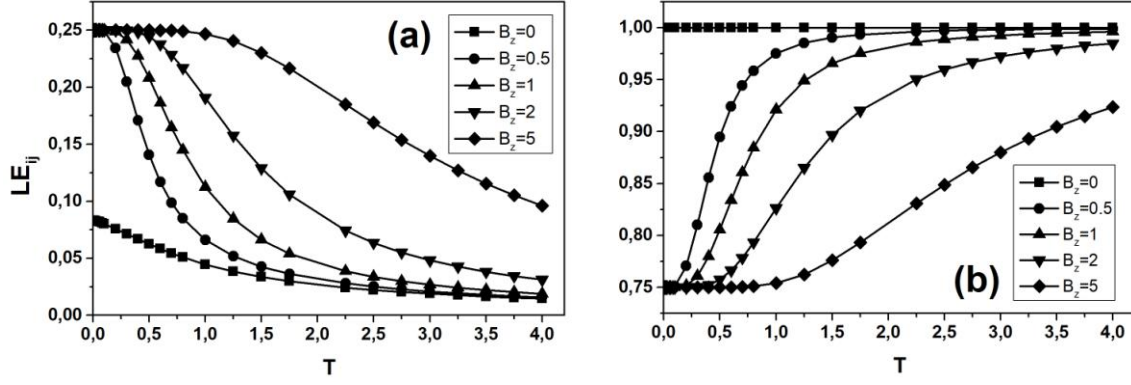
3.3.1. Birinci Tip Karışık Durumlar

Loop algoritması kullanılarak yapılan ölçümlerde elde edilen spin başına ortalama mıknatıslanma ve iç enerji sıcaklığın fonksiyonu olarak Şekil 3.43’de aktarıldığı gibidir. Dipol-dipol etkileşmesinin ihmal edildiği durum için farklı harici manyetik alan değerleri için bu iki termodinamik niceliğin davranışı sunulmuştur. Mıknatıslanma grafiğinde (Şekil 3.43(a)) manyetik alan arttıkça faz sıcaklığının arttığı görülmektedir. Ayrıca bu tip karışık sistemin davranışı ferromanyetik sistemin davranışına benzerdir. Bunun en önemli sebebi bu tip karışık durumda $-z$ projeksiyonunda sistemin ferromanyetik diğer projeksiyonlarda antiferromanyetik olmasıdır.



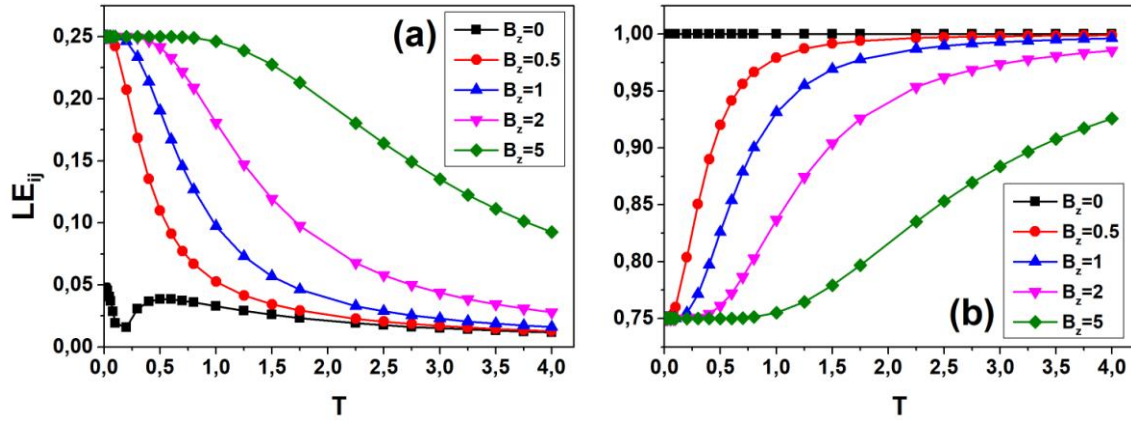
Şekil 3.43. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5$, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) spin başına mıknatıslanma (b) enerji yoğunluğu

Şekil 3.43(b) incelendiğinde harici manyetik alan artışının sistemin iç enerjisini düşürdüğü görülmektedir. Bu davranış, antiferromanyetik ve ferromanyetik model ile farklılık göstermemektedir. Şekil 3.43’den yüksek manyetik alan ve düşük manyetik alan değerleri kolayca belirlenebilir. Buna göre $B_z=5$ yüksek manyetik alan değeridir; $B_z=0.5$ ise düşük manyetik alan değeridir.



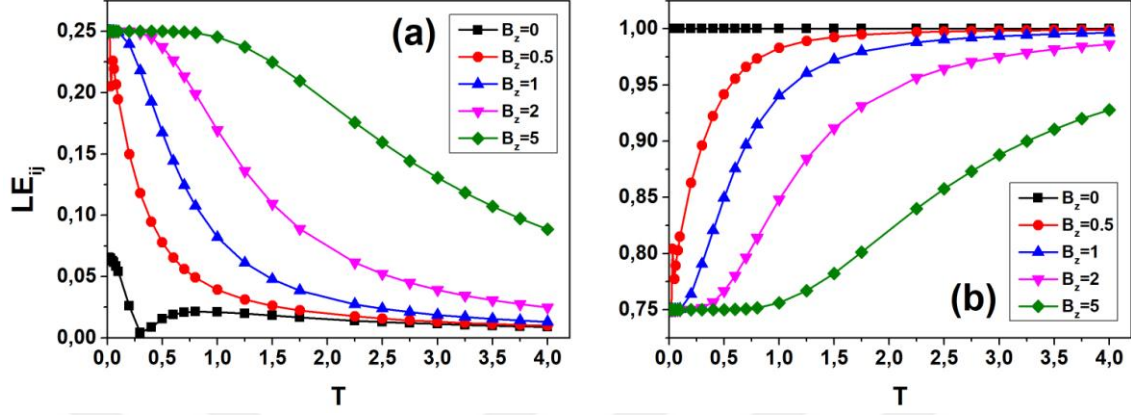
Şekil 3.44. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın üst sınırı (b) dolaşıklığın alt sınırı

Dipol-dipol etkileşmesinin katkısının bulunmadığı durumda ($D=0$), farklı harici manyetik alanlar altında dolaşıklığın alt ve üst sınırlarının sıcaklığa göre değişimi Şekil 3.44’de açıkça gösterilmiştir. Dolaşıklığın alt sınırının (Şekil 3.44(a)) sıcaklıkla azaldığı aşikardır. Harici alan arttıkça bu davranış değişmemekle beraber daha yüksek sıcaklıklarda alt sınırın maksimum değerinden uzaklaştığı görülmektedir. Ayrıca $B_z=5$ yüksek alan altında yüksek sıcaklıkta $LE_{ij}^{ub} \approx 0.1$ civarında iken diğer alanlar altında $LE_{ij}^{ub} < 0.05$ olduğu görülmektedir.

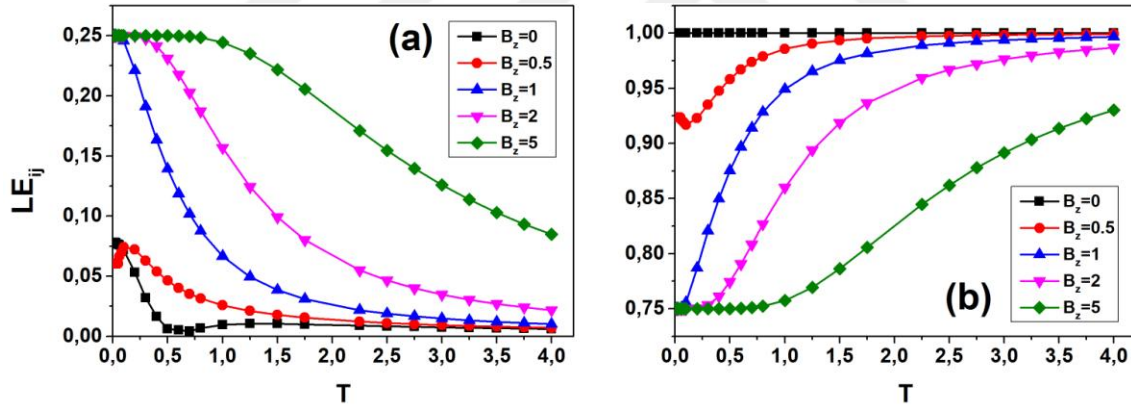


Şekil 3.45. $D=0.25$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

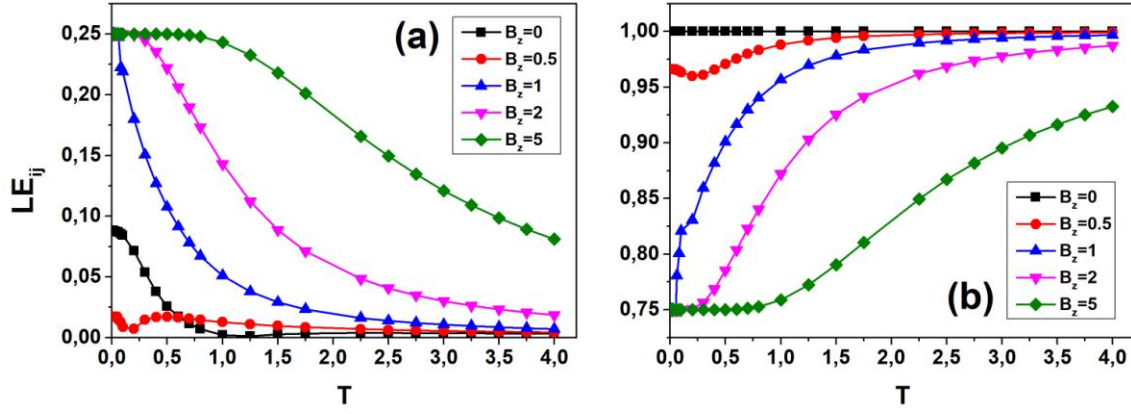
Üst sınır, (Şekil 3.44(b)) alan artıka alt sınıra yaklaşımaktadır. Özellikle yüksek alan $B_z=5$ için en yakın olduğu durumdur. Diğer tüm modellerde olduğu gibi bu tip karışık durumda da dolaşıklığın sınırlarının sıcaklığa göre değişimi sistematiktir.



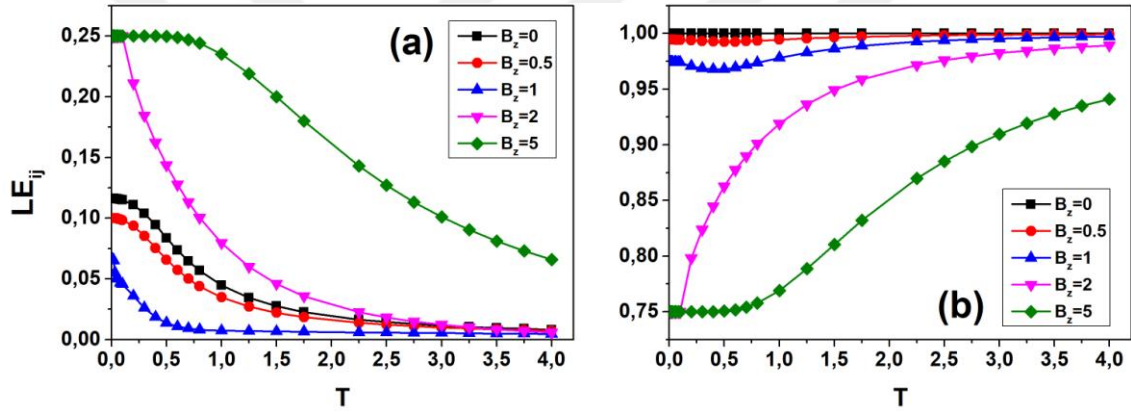
Şekil 3.46. $D=0.5$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı



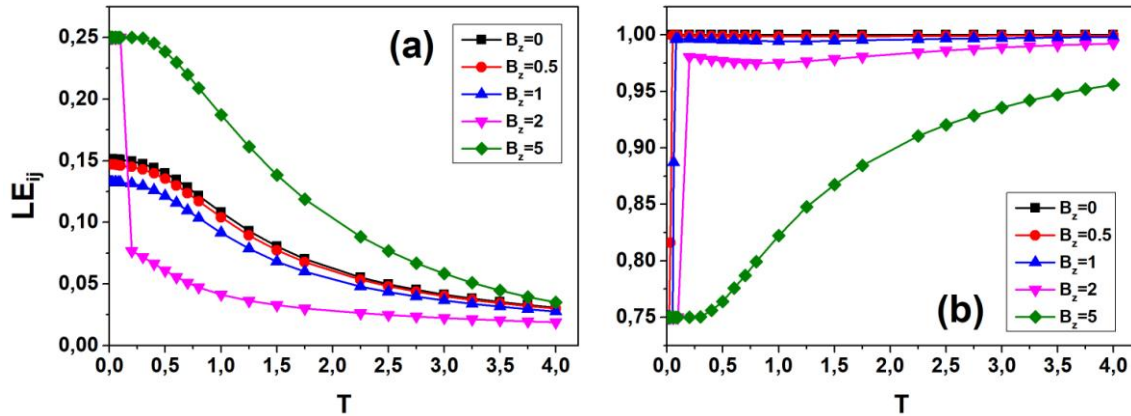
Şekil 3.47. $D=0.75$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0$, 0.5, 1, 2, 5 harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı



Şekil 3.48. $D=1$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

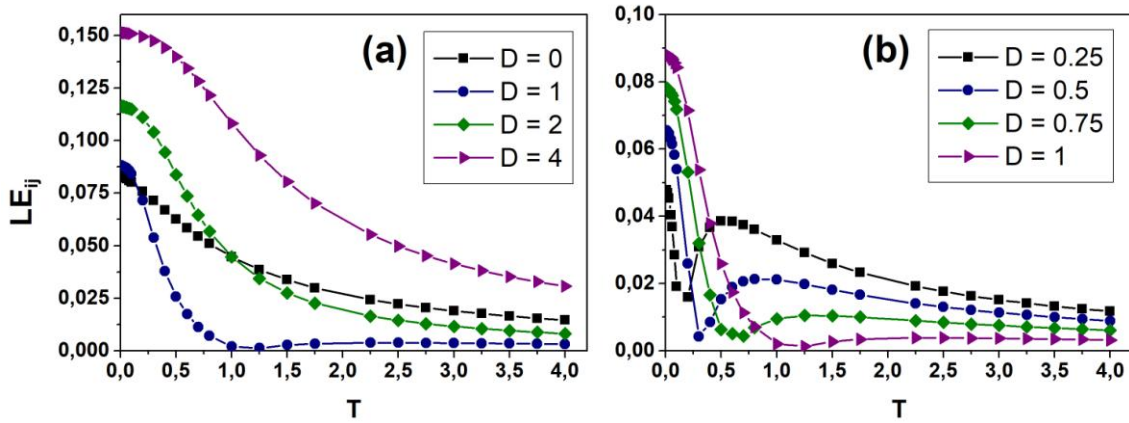


Şekil 3.49. $D=2$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı



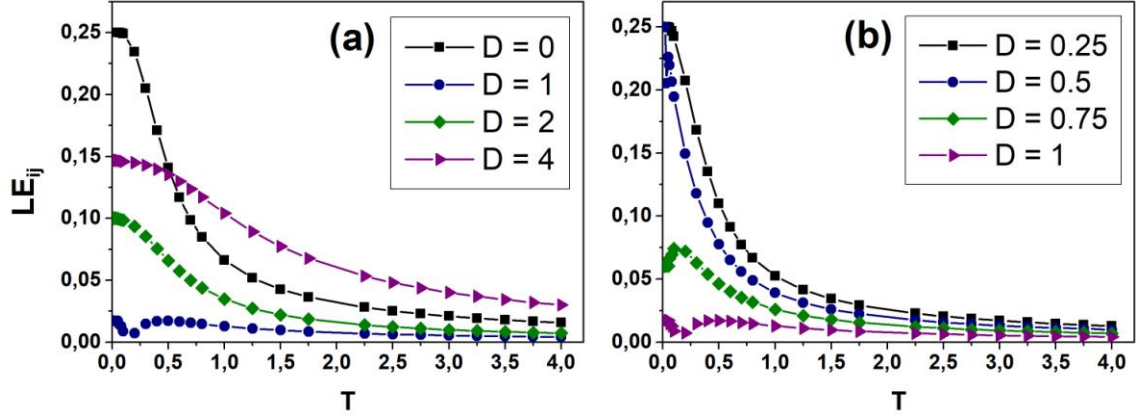
Şekil 3.50. $D=4$ dipol-dipol sabiti, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

Şekil 3.51 incelendiğinde harici alan yokluğunda $1>D>0$ aralığında D arttıkça düşük sıcaklık değerlerinde alt sınırın aldığı değerler için sıcaklığa göre uyanış fenomeni tarzında bir davranış bulunduğu söylenebilir. $D\geq 1$ için D arttıkça alt sınırın aldığı değerler de artmaktadır. Sıcaklığa bağlı davranış ise monoton azalandır.



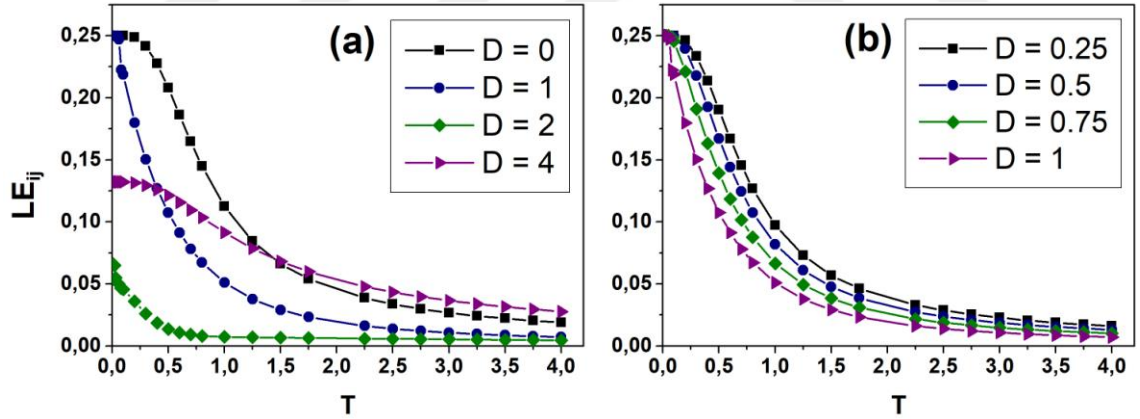
Şekil 3.51. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$

$B_z=0.5$ harici alan altında $1>D>0$ aralığında D arttıkça alt sınır değerleri azalmaktadır. Bu aralıkta en düşük D değeri ($D=0.25$) en yüksek alt sınır değerlerine sahiptir (düşük sıcaklıkta). $D>1$ için D arttıkça alt sınırın aldığı değerlerin arttığı görülmektedir. $D=2$ ve $D=4$, $D=0.25$ ve $D=0.5$ 'de olduğu kadar, çok düşük sıcaklıklarda, dolaşık olamamaktadır. Fakat $D=4$ sıcaklığın bozucu etkisine karşı koymakta ve alt sınırın sıcaklığa göre değişiminde dolaşıklığın miktarını diğer D değerlerine nazaran daha fazla sıfırdan uzak tutmaktadır.



Şekil 3.52. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D= 0.25, 0.5, 0.75, 1$

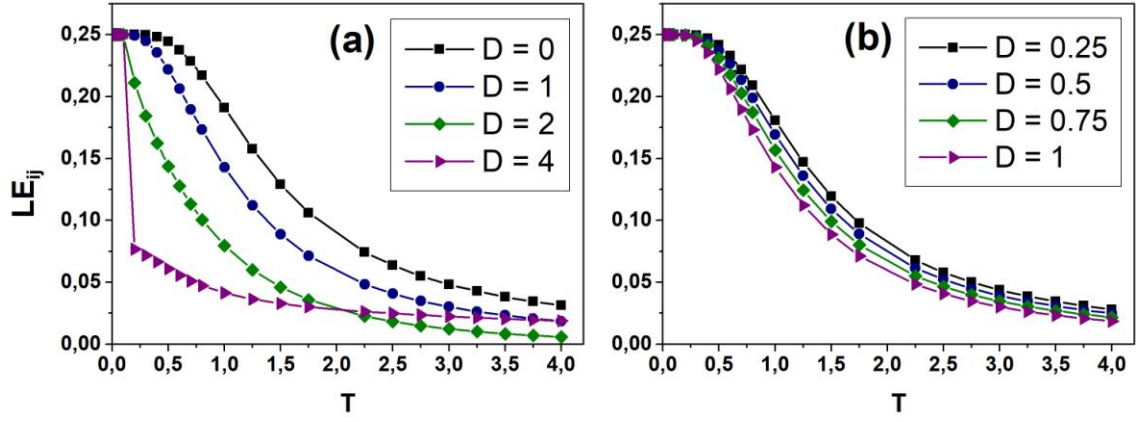
$B_z=1$ harici alan altında $2 \geq D > 0$ aralığında dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerler azalmaktadır. $D > 2$ için artış gösteren alt sınır için sıcaklık arttıkça tüm D sabitleri için dolaşıklığın sifıra yaklaştığı sadece $D=2$ için $T \geq 0.6$ sıcaklığından sonra sönümlendiği söylenebilir.



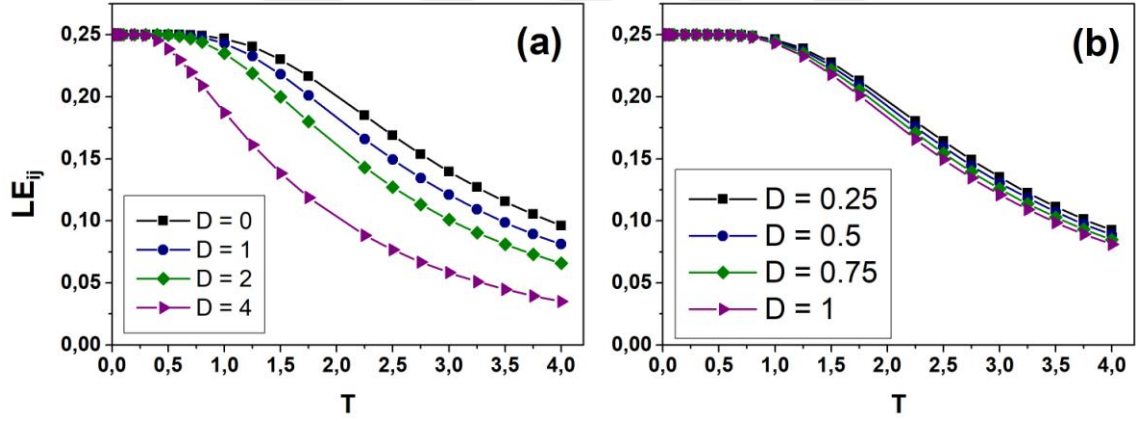
Şekil 3.53. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D= 0.25, 0.5, 0.75, 1$

Harici alan arttıkça sistemin bu davranışı değişmektedir. D değerleri arttıkça alt sınırın değerleri monoton azalmaktadır (Şekil 3.54 ve Şekil 3.55). Birinci tip karışık durum için üst sınır harici alan yokluğunda tüm D değerleri için maksimum değerine sahiptir ve üst üste gelmektedir (Şekil 3.56). Harici alan arttıkça D 'nin azalmasıyla üst sınır düşük

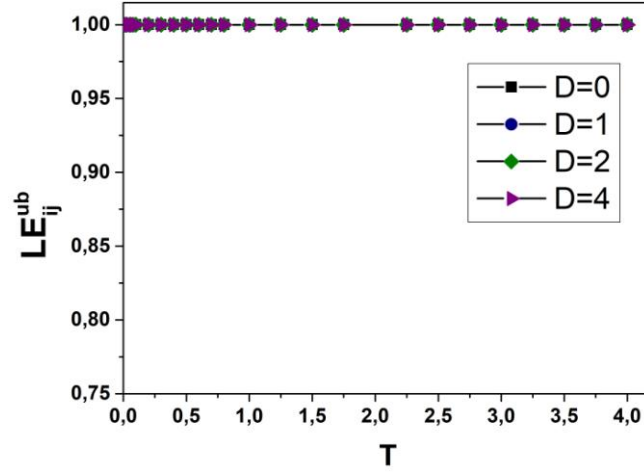
sıcaklıklar için azalmakta iken $T \geq 1.5$ için hepsi maksimum değerde üst üste gelmektedir.



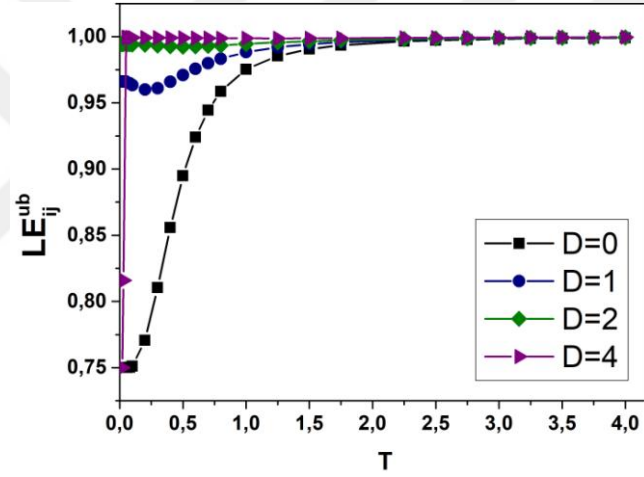
Şekil 3.54. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D= 0.25, 0.5, 0.75, 1$



Şekil 3.55. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D= 0.25, 0.5, 0.75, 1$

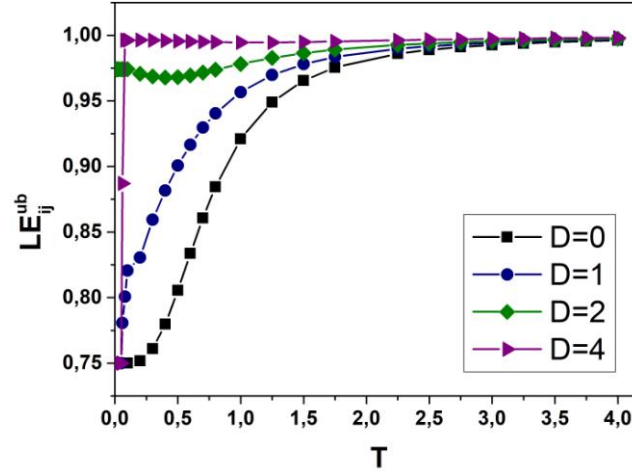


Şekil 3.56. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

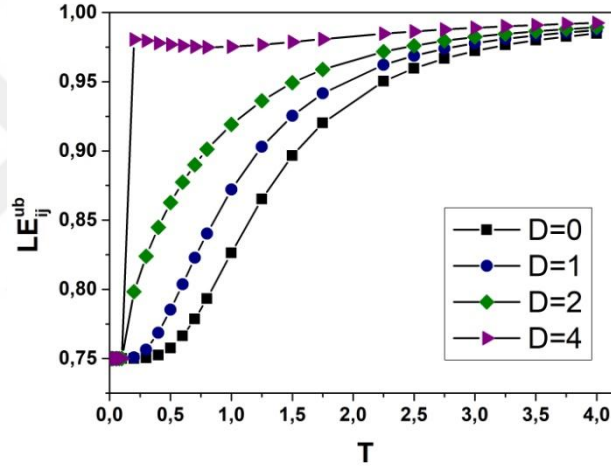


Şekil 3.57. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

$5 > B_z \geq 0$ bu davranış değişmemekle birlikte tüm D eğrilerinin üst üste gelmeye başladığı T sıcaklığının değeri artmaktadır. $B_z=5$ yüksek harici alan altında ise tüm D değerlerine karşılık gelen üst sınır değerleri azalmakta ve sıcaklıkla maksimum değerine ulaşır üst üste gelmemektedir.

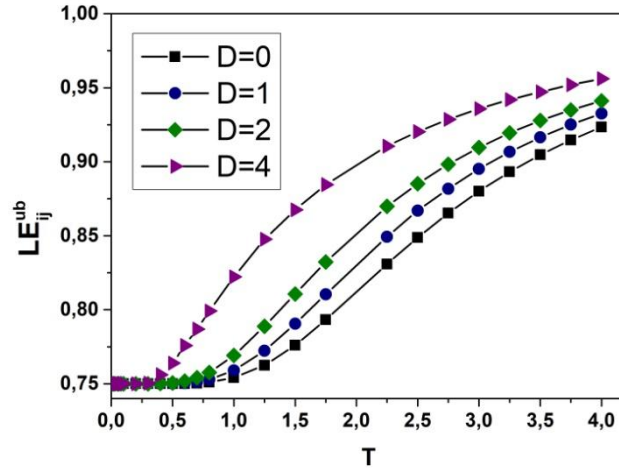


Şekil 3.58. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı



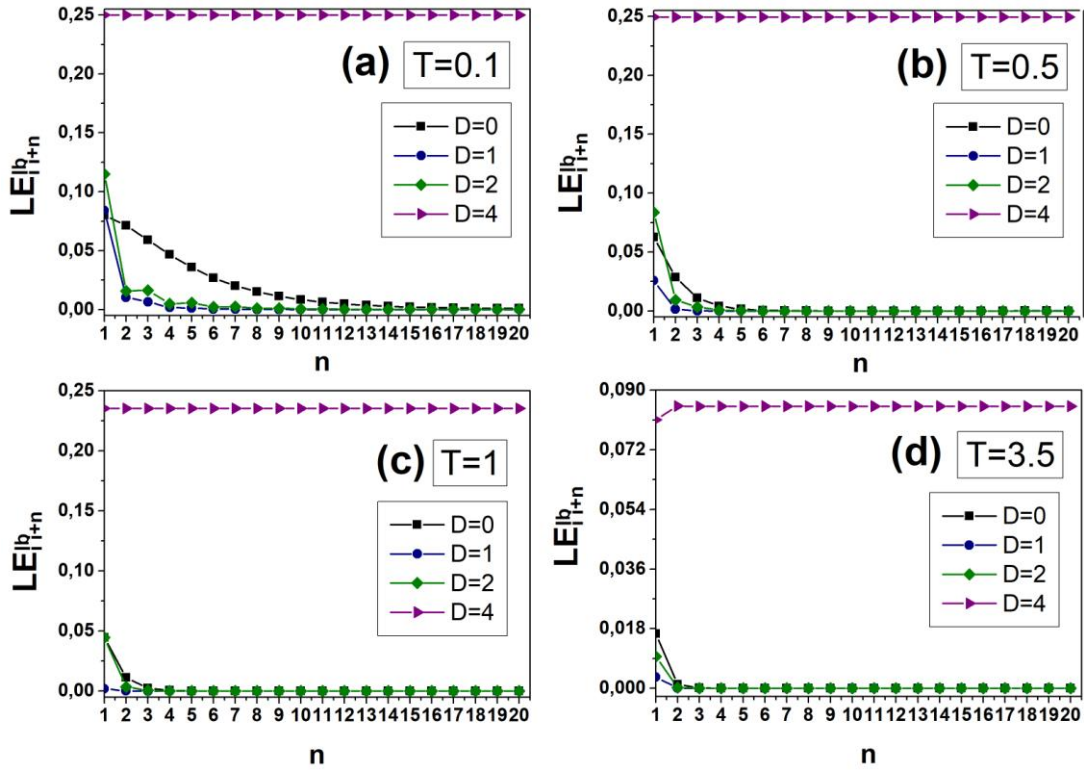
Şekil 3.59. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

Birinci tip karışık modelde en yakın komşu spinler arasında lokalize dolaşıklık, alt ve üst sınırlar üzerinden belirlenmeye çalışılmıştır. Dipol-dipol etkileşmesinin(uzun erimli etkileşme) AFM ve FM modellerde diğer yakın n. komşu spinler üzerinde uzaklığa bağlı etkisi önceki bölümde ortaya konmuştur. Bu tip karışık durum için de bu etki incelenmiştir.



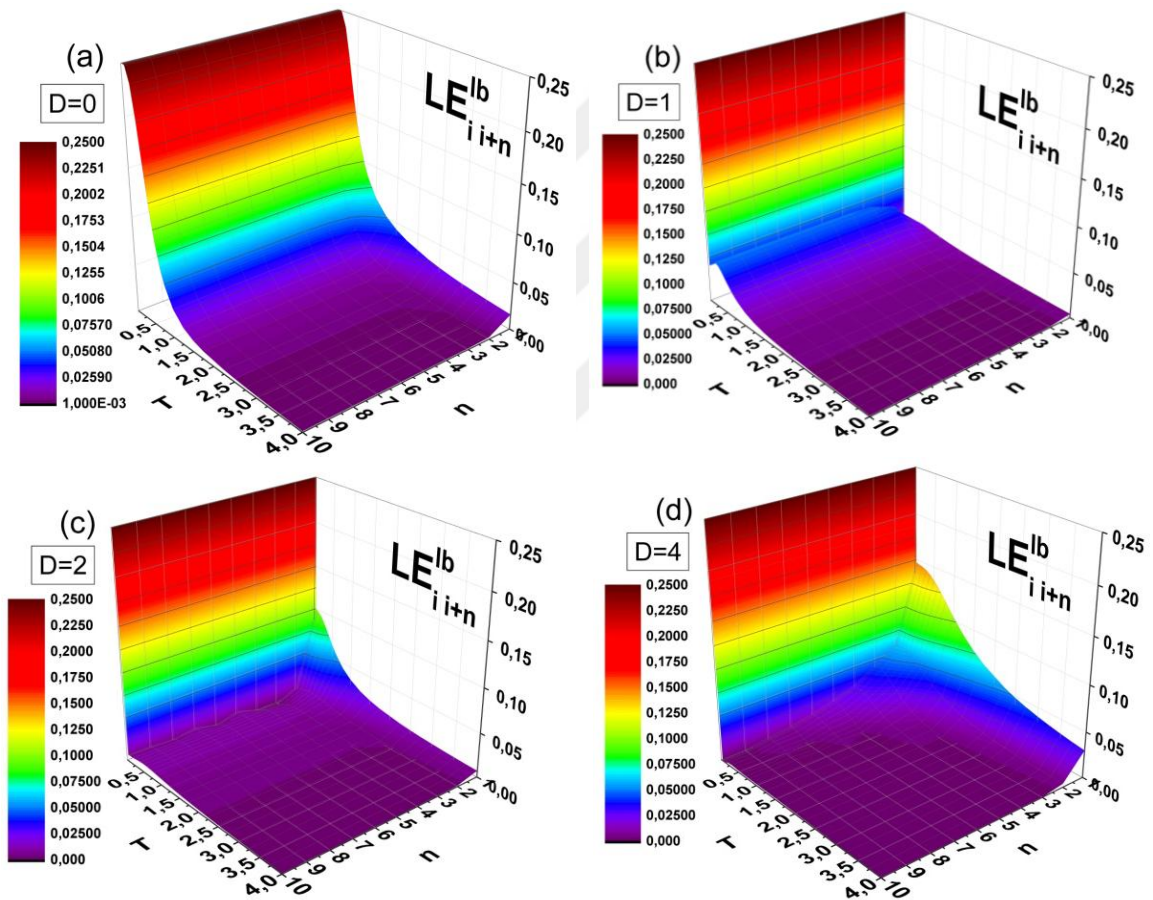
Şekil 3.60. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=-1$, $J_y=-1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

Birinci tip karışık model için $B_z=0$ 'da, $T=0.1, 0.5, 1, 3.5$ sıcaklıklarında $D=0, 1, 2$ ve 4 için dolaşıklığın alt sınırının n . en yakın komşu spinlere göre davranışı Şekil 3.61 ile verilmektedir. Tüm sıcaklık değerlerinde $D=4$ baskın değeri için n komşu spin uzaklığı arttıkça alt sınırın değeri değişmemekle beraber maksimum değerindedir.



Şekil 3.61. En yakın 20 komşu ve $B_z=0$ için dolaşıklığın alt sınırı (a) $T=0.1$ (b) $T=0.5$ (c) $T=1$ (d) $T=3.5$

Çok yüksek sıcaklıkta ($T=3.5$) ise bu davranış değişmemekle birlikte maksimum değerde değildir. Buradan hareketle sıcaklık arttıkça 20 en yakın komşu için $D=4$ değerinde artan uzaklığa bağlı olarak alt sınırın değişmediği söylenebilir. Diğer dipol sabitleri için durum biraz daha farklıdır. $T=0.1$ 'de dipol-dipol etkileşmesinin yokluğunda $n=10$ komşu spine kadar dolaşıklığın alt sınırı sönümlenmemektedir. $T=0.5$ 'de ise sıcaklığın bozucu etkisi $D=0$ için dolaşık olan en yakın $n=10$ komşu spin sayısını azaltmıştır. $T \geq 1$ sıcaklıklarında 2.komşu spinden itibaren tüm D değerleri için alt sınır sönümlenmiştir. $D < 4$ için sıcaklığın bozucu etkisi baskın olmakla beraber dipol-dipol etkisini en aza indirmektedir.

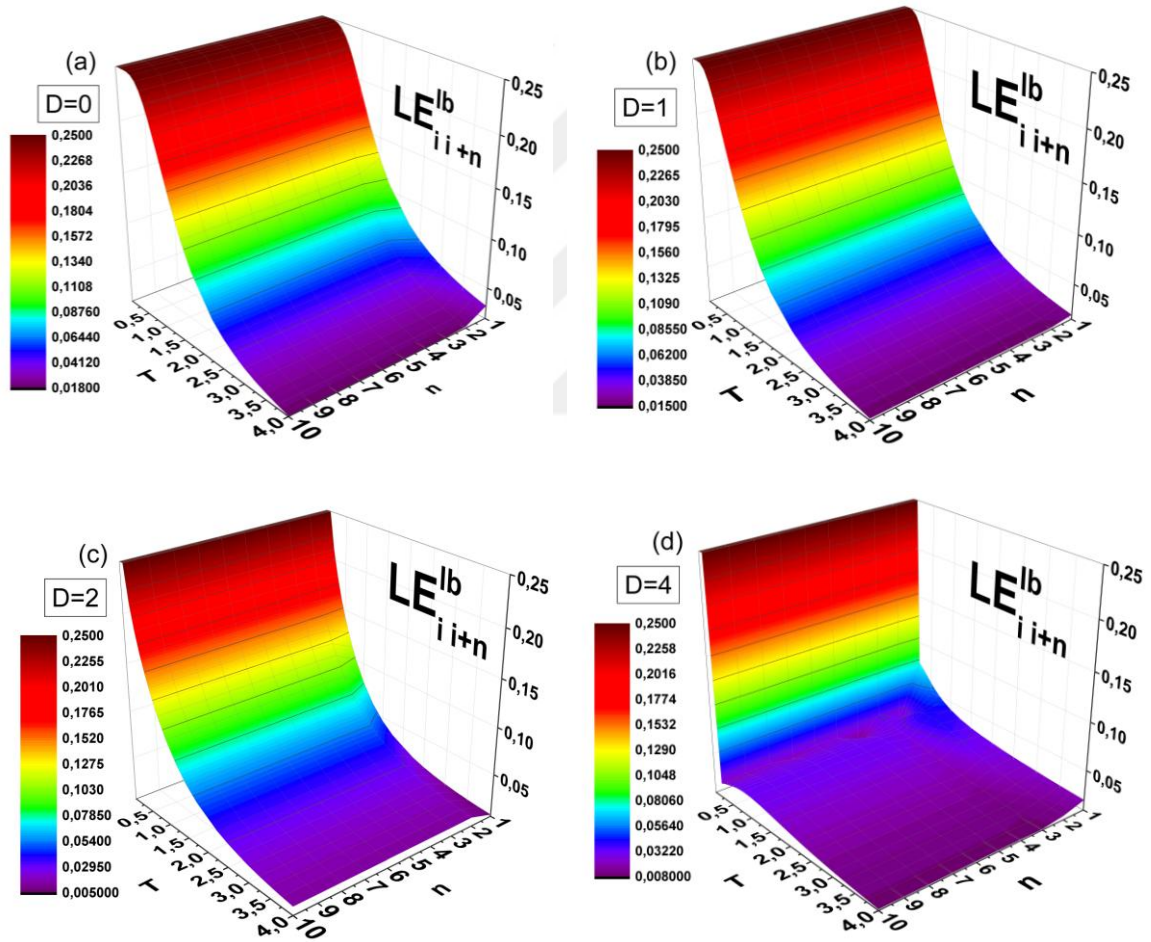


Şekil 3.62. $B_z=0.5$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi

Harici manyetik alan $B_z=0.5$ altında n . komşu sayısına göre dolaşıklığın alt sınırının sıcaklıkla değişimi $D=0, 1, 2$ ve 4 için sırasıyla Şekil 3.62 ile verilmektedir. $B_z=0.5$ 'de $D=0$ için ilk 10 komşu spinin sıcaklıkla davranışı monoton olmakla beraber düşük sıcaklıklarda n sayısına göre değişmemektedir. $D=1$ 'de düşük sıcaklıklarda tüm komşu

spinler için alt sınır ani bir değer kaybına uğramıştır ve $T=0.5$ sıcaklığına kadar değeri artmıştır. Bu düşük sıcaklık değerlerinde ilk ve 2. komşu spinler, $n=1$ ve $n=2$, diğer komşu spinlere göre daha düşük alt sınır değerlerine sahiptir. $D=4$ hem yüksek hem de düşük sıcaklıklarda alt sınırın en yüksek olduğu değerdir. $B_z=2$ için $D=4$ hariç diğer tüm D sabitlerinin sistem üzerinde herhangi bir etkisi bulunmamaktadır. $D=4$ 'te $n=4$ için zayıf bir tek-çift etkisi görülmektedir. Ayrıca D arttıkça alt sınırın aldığı değerler sıcaklığa ve yakın komşu spin sayısı n 'e göre azalmaktadır.

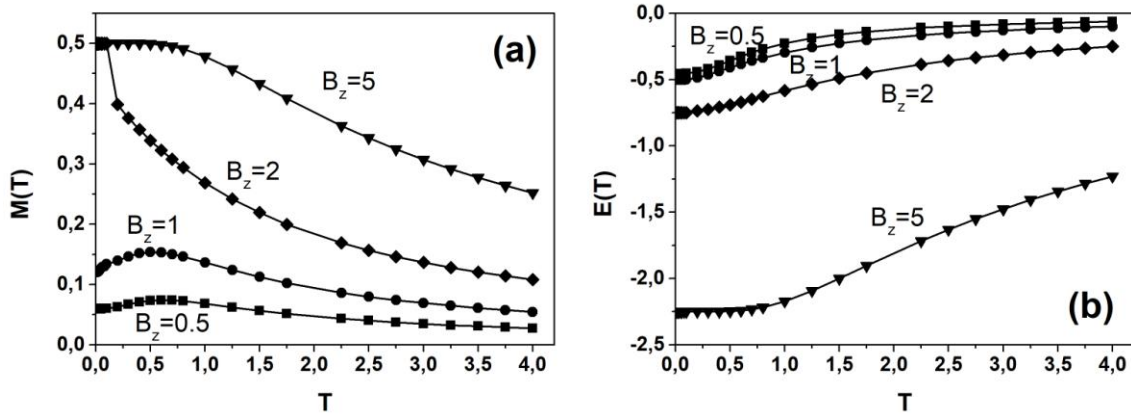
Harici manyetik alan $B_z=2$ altında n . komşu sayısına göre dolaşıklığın alt sınırının sıcaklıkla değişimi $D=0, 1, 2$ ve 4 için sırasıyla Şekil 3.63 ile verilmektedir.



Şekil 3.63. $B_z=2$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi

3.3.2. İkinci Tip Karışık Durumlar

İkinci tip karışık durumlarda $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ olarak belirlenmiştir. x ve y projeksiyonundaki takas etkileşmesi ferromanyetik, $-z$ 'de ise antiferromanyetiktir. Loop algoritması kullanılarak yapılan ölçümlerde elde edilen spin başına ortalama mıknatıslanma ve iç enerji sıcaklığın fonksiyonu olarak Şekil 3.64'de aktarıldığı gibidir. Dipol-dipol etkileşmesinin ihmal edildiği durum için ($D=0$) farklı harici manyetik alanlar altında bu iki termodinamik niceliğin davranışı sunulmuştur. $B_z=0.5$ ve $B_z=1$ harici alanları altında düşük sıcaklıklarda düşük mıknatıslanmaya sahiptir. Yüksek alan değerlerinde ise Zeeman etkisi düşük sıcaklıklarda mıknatıslanmayı arttırır da $B_z=2$ 'de çok düşük sıcaklıklarda spin başına mıknatıslanma $T>0.25$ için takas etkileşmesi ve sıcaklığın bozucu etkisi ile azalmaktadır Şekil 3.64(a). Alan arttıkça enerjinin aldığı değerler azalmaktadır (Şekil 3.64(b)). $B_z=5$ 'in çok yüksek alan değeri olduğu Şekil 3.64(b) incelendiğinde anlaşılmaktadır.

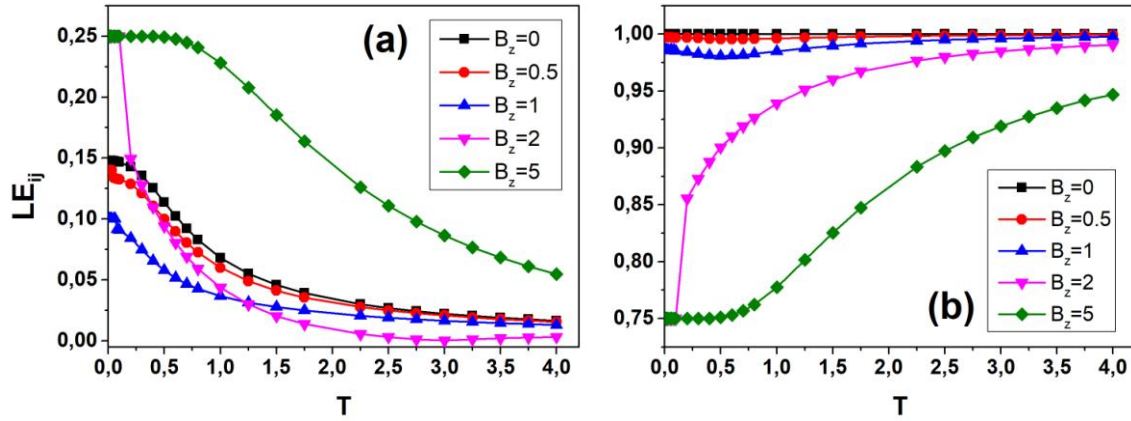


Şekil 3.64. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) spin başına mıknatıslanma (b) enerji yoğunluğu

Dipol-dipol etkileşmesinin yokluğunda bu tip karışık sistem için dolaşıklığın alt ve üst sınırları Şekil 3.65'te belirlenmiştir. $B_z < 2$ harici alanlar altında alan değeri arttıkça dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerler azalmakta; sıcaklığın bozucu etkisi ile yüksek sıcaklık altında örtüşmektedir. $B_z > 1$ için alt sınır harici alanın artışı ile doğru orantılı olarak artmaktadır. $B_z=2$ düşük sıcaklarda yüksek alt sınır değerlerine sahip iken

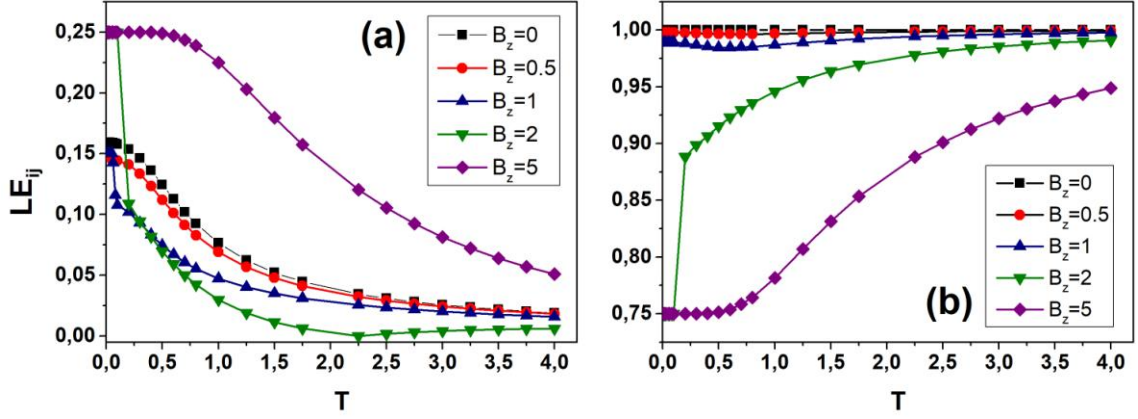
$T > 0.25$ 'den sonra ani azalmaktadır ve sıfıra en çok yaklaştığı sıcaklık değeri $T=3$ 'tür. Bu sıcaklık değerinden sonra alt sınır tekrar artış göstermiştir (Şekil 3.65(a)).

$B_z \leq 1$ harici alanlar altında dolaşıklığın üst sınırı sıcaklıkla değişmez durumda ve maksimum değerini almaktadır. $B_z > 1$ harici alanları altında ise sıcaklıkla üst sınır değişmekte ve alt sınırdan uzaklaşmaktadır (Şekil 3.65(b)).

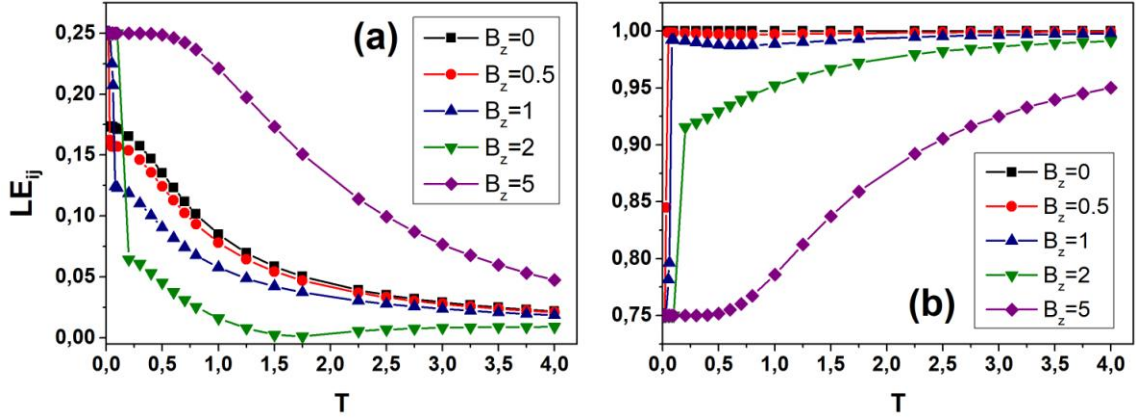


Şekil 3.65. $D=0$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

Dipol-dipol etkileşmesi hesaba katıldığında, $D=0.25$ için, $B_z=2$ için alt sınırdaki gözlenen davranış benzerdir $T > 2.25$ sıcaklık değerinden sonra artan sıcaklık ile dolaşıklık artışı göstermiştir (monoton olmayan davranış). Küçük D değerleri için sistemin alt ve üst sınır için davranışı aynıdır (Şekil 3.66(a)). $D=0.5$ değeri için $B_z=2$ değerinde monoton olmayan durum daha belirgin şekilde fark edilebilir. Ayrıca bu alan değerinden sonra alan arttıkça dolaşıklığın alt sınırının aldığı artmaktadır. $2 > B > 0$ için alan arttıkça dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerler azalmaktadır. Üst sınır da az önce tartışılan D değeri ile aynı özelliği göstermektedir.

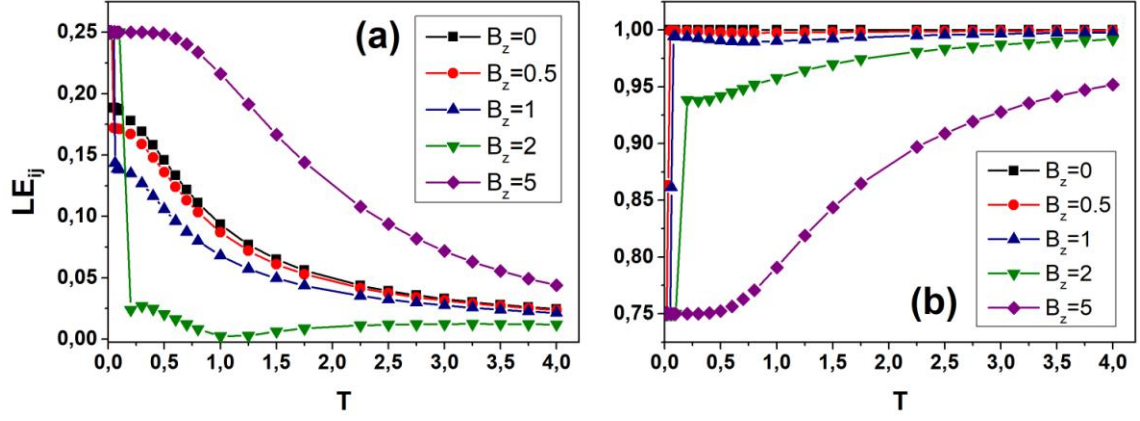


Şekil 3.66. $D=0.25$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

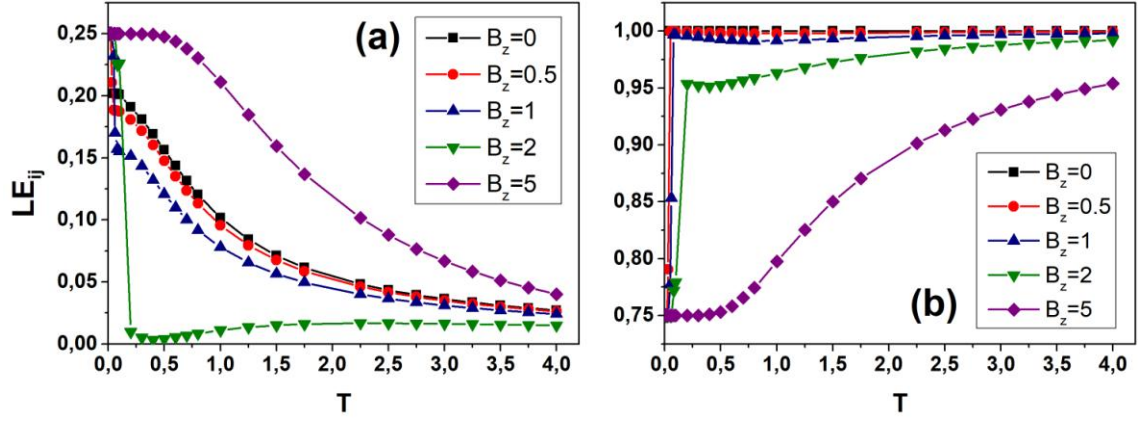


Şekil 3.67. $D=0.5$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

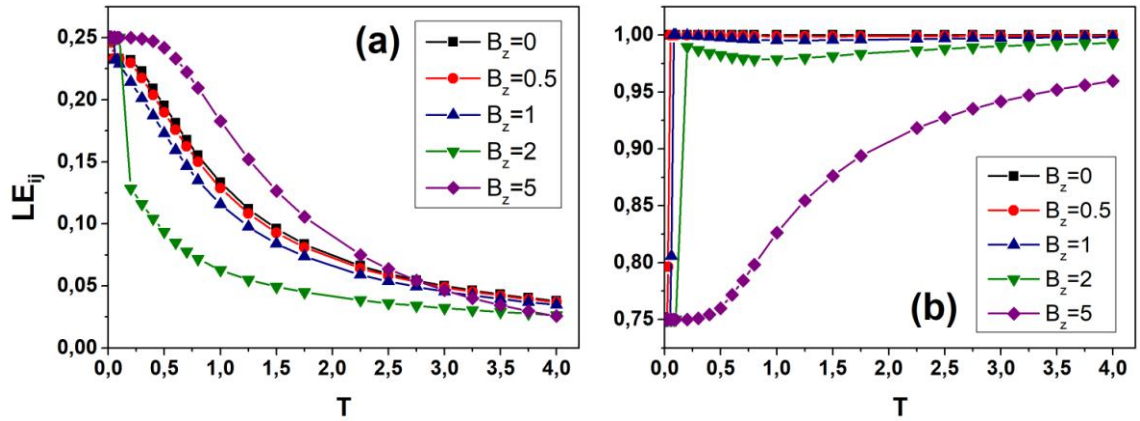
Dolaşıklığın alt sınırının sönümlendiği sıcaklık değeri dipol-dipol etkileşme sabiti D arttıkça küçülmektedir. $D>1$ için bu davranış ortadan kalkmaktadır. $D=4$ değerinde üst sınır $B_z<5$ harici alanları altında sıcaklığa bağlı değişim göstermemekte ve neredeyse aldığı değerler örtüşmektedir. Bu D değerine kadar $B_z=2$ harici alan altında üst sınırın aldığı değerler $B_z=5$ 'ten uzaklaşmakta ve diğer alan değerleri ile örtüşme eğilimi göstermektedir. $D=4$ için dolaşıklığın alt sınırı artan harici alan ile doğru orantılı artmakta ve alt sınırının maksimum olduğu sıcaklık değeri büyümektedir.



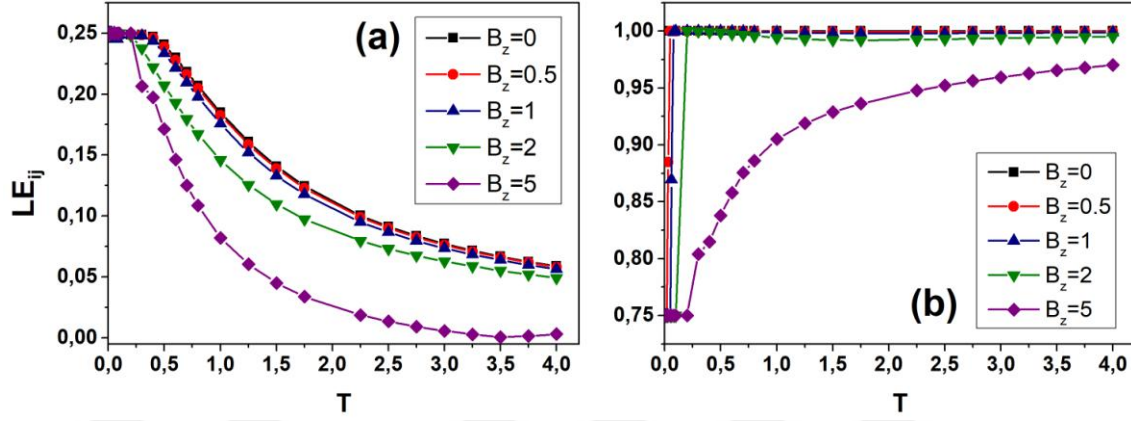
Şekil 3.68. $D=0.75$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı



Şekil 3.69. $D=1$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

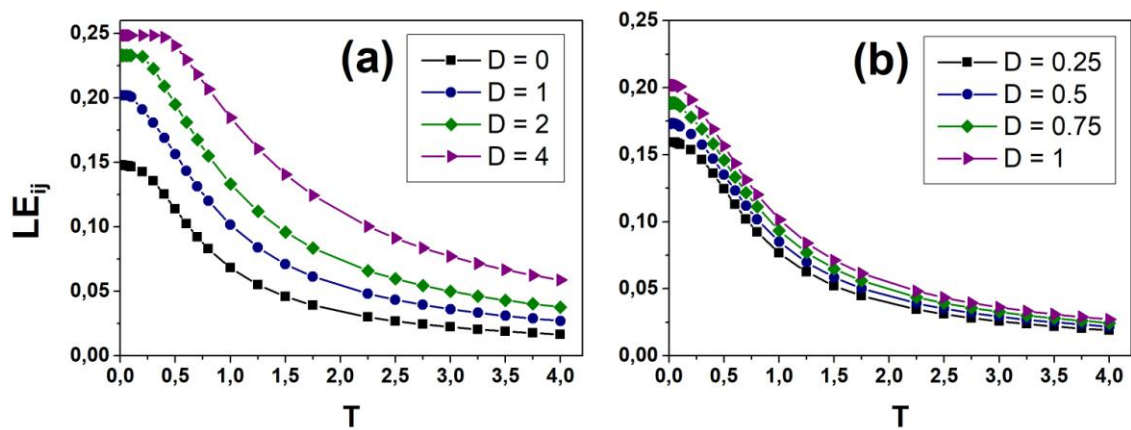


Şekil 3.70. $D=2$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

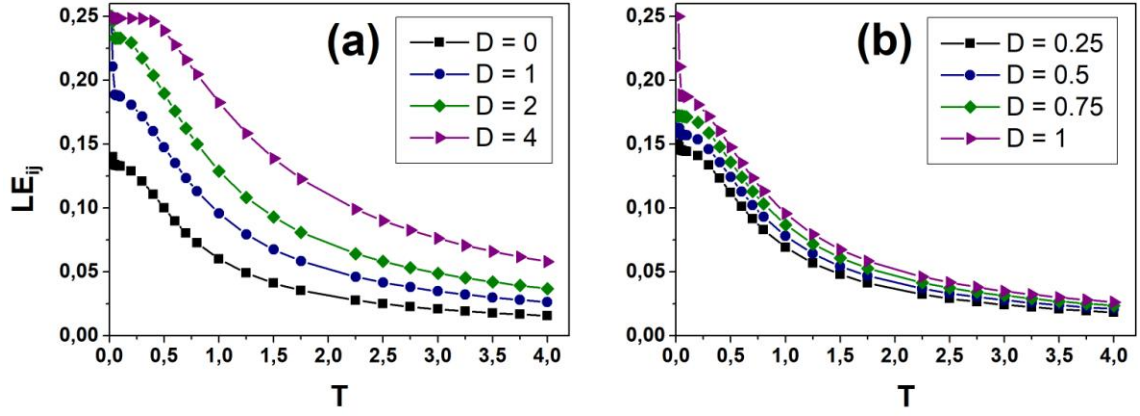


Şekil 3.71. $D=4$ dipol-dipol sabiti, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0, 0.5, 1, 2, 5$ harici manyetik alanları altında sıcaklığa bağlı olarak (a) dolaşıklığın alt sınırı (b) dolaşıklığın üst sınırı

Harici alanın yokluğunda D arttıkça dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerlerde artmaktadır. Her D değeri için dolaşıklığın alt sınırı sıcaklık arttıkça azalmaktadır. Sıcaklığın maksimum olduğu sıcaklık değeri ise D arttıkça artmaktadır (Şekil 3.72(a)). $B_z \leq 1$ harici alan altında alt sınırın davranışı değişmez iken yüksek sıcaklıklarda dahi alt sınır sönümlenmemektedir.

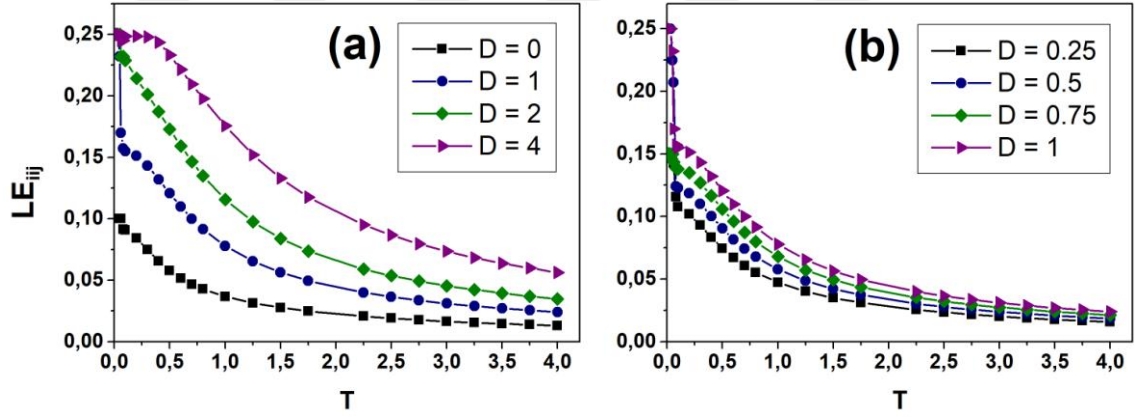


Şekil 3.72. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75, 1$



Şekil 3.73. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75,$

1

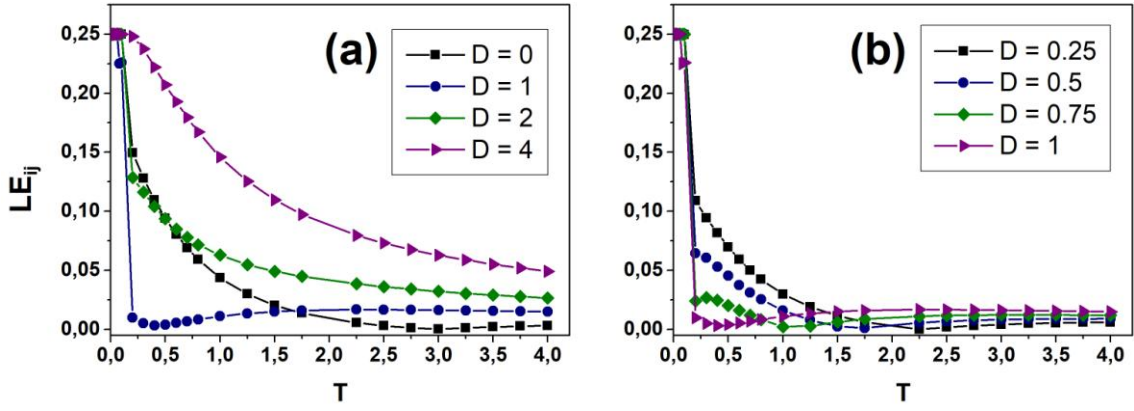


Şekil 3.74. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75,$

1

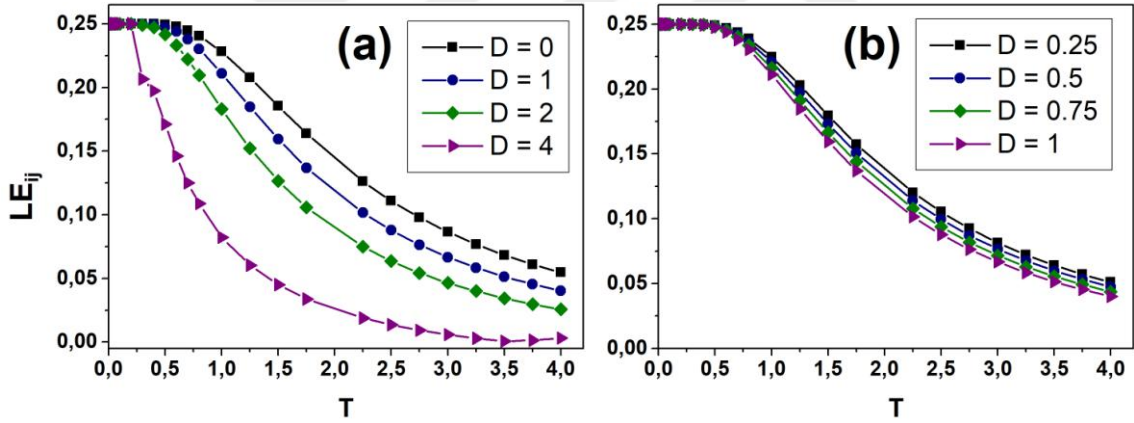
$B_z=2$ harici alan altında alt sınırın aldığı değerler, (Şekil 3.75(b)) dikkatli bir biçimde incelendiğinde $1 > D > 0$ aralığında D arttıkça azalmaktadır. Dolaşıklık miktarındaki bu azamla düşük sıcaklıklarda daha belirgindir. Bununla birlikte bu aralıktaki her D değeri için monoton olmayan bir durum söz konusudur. D arttıkça alt sınırın sönümlendiği T sıcaklık değeri azalmaktadır ve tekrar dolaşıklık artmaya (sıfırdan uzaklaştığında) başladığında daha yüksek değerler kazanmaktadır. Şekil 3.75(a) ise $D \geq 1$ değerinden sonra D arttıkça dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerlerin azaldığını göstermektedir. $D > 1$ için sıcaklık ile monoton azalan bir davranış söz konusudur ve yüksek

sıcaklıklarda aldığı değerler D arttıkça artmaktadır. $B_z=5$ alana maruz iken sistemde alt sınır dipol-dipol sabiti D arttıkça azalmaktadır (Şekil 3.76).



Şekil 3.75. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75,$

1

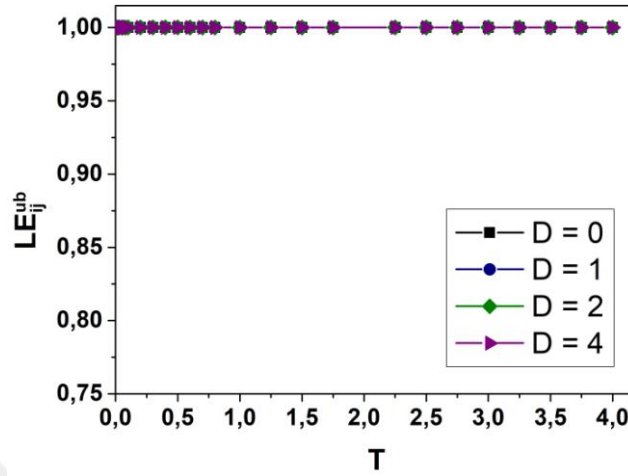


Şekil 3.76. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı (a) $D=0, 1, 2, 4$ (b) $D=0.25, 0.5, 0.75,$

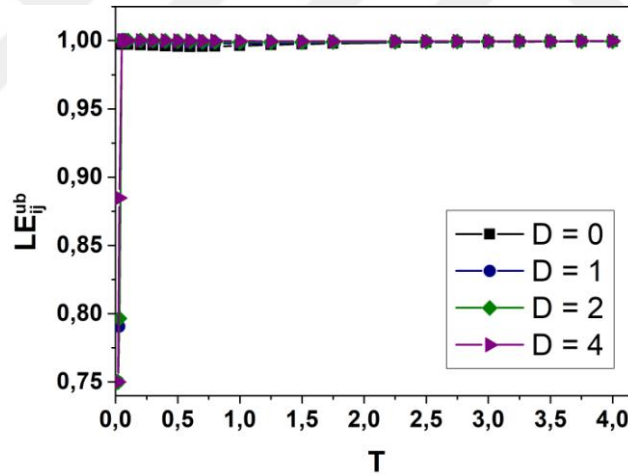
1

Dolaşıklığın üst sınırı harici alan yok iken tüm D değerleri için maksimum değerler almakta ve bu değerler neredeyse üst üste gelmektedir (Şekil 3.77). $B_z=0.5$ için de aynı durum söz konusudur (Şekil 3.77). $B_z>0.5$ için artan D değerleriyle ters orantılı olarak üst sınırın aldığı değerler azalmaktadır. Çok yüksek alan altında bu ayrıklık belirgin bir şekilde görülmektedir. Ayrıca $B_z=2$ için tüm D değerlerinde üst sınırın artmaya

başladığı T sıcaklığı birbirine çok yakındır ($T \approx 0.13$). $B_z=5$ harici alanda, tüm D arttıkça üst sınırın artmaya başladığı kritik sıcaklık değeri azalmaktadır.

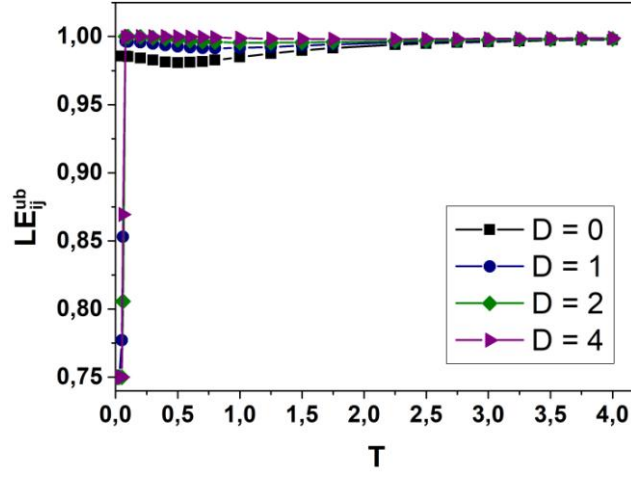


Şekil 3.77. $B_z=0$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

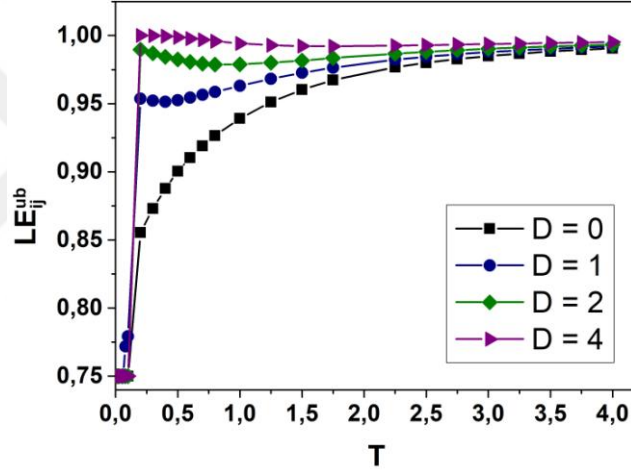


Şekil 3.78. $B_z=0.5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

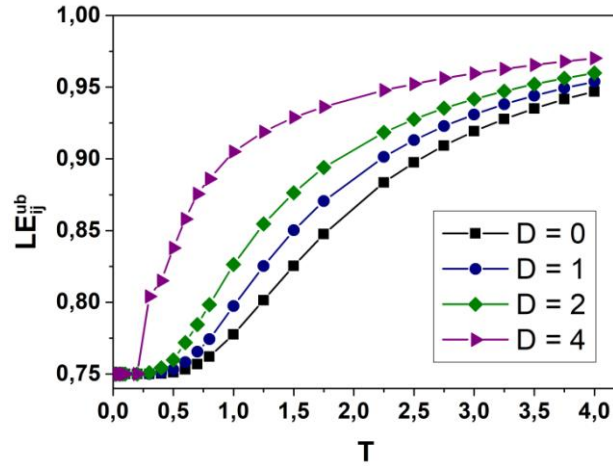
En yakın komşular için D , B_z ve T 'ye bağlı dolaşıklığın alt ve üst sınırlarının davranışı incelenmiştir. Uzun erimli bir etkileşme olarak dipol-dipol etkileşmesinin diğer yakın komşulara etkisi üzerine yorumlar yapmak için öncelikle harici alan yokluğun ilk 20 komşu için ($n=20$) bazı sıcaklık değerleri için alt sınırın davranışı belirlenmiştir. İlk spin ile son spin veya daha uzak spinler arasındaki dolaşıklığın mertebisini ve davranışını belirlemek iki nokta arasındaki bilgi transferi açısından önem taşımaktadır.



Şekil 3.79. $B_z=1$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

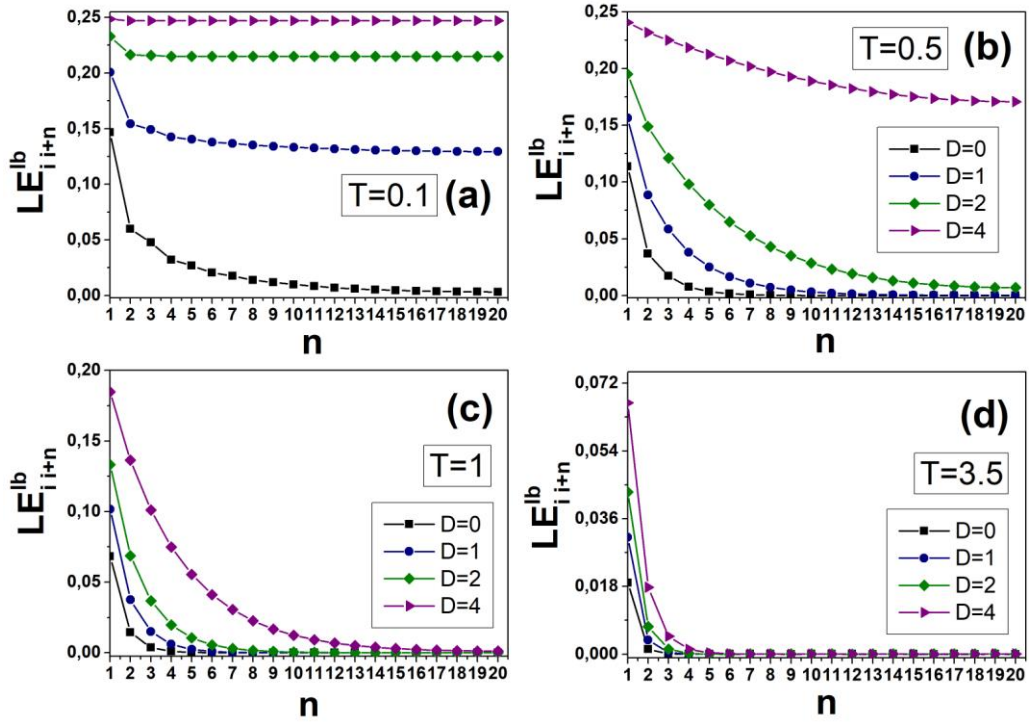


Şekil 3.80. $B_z=2$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı



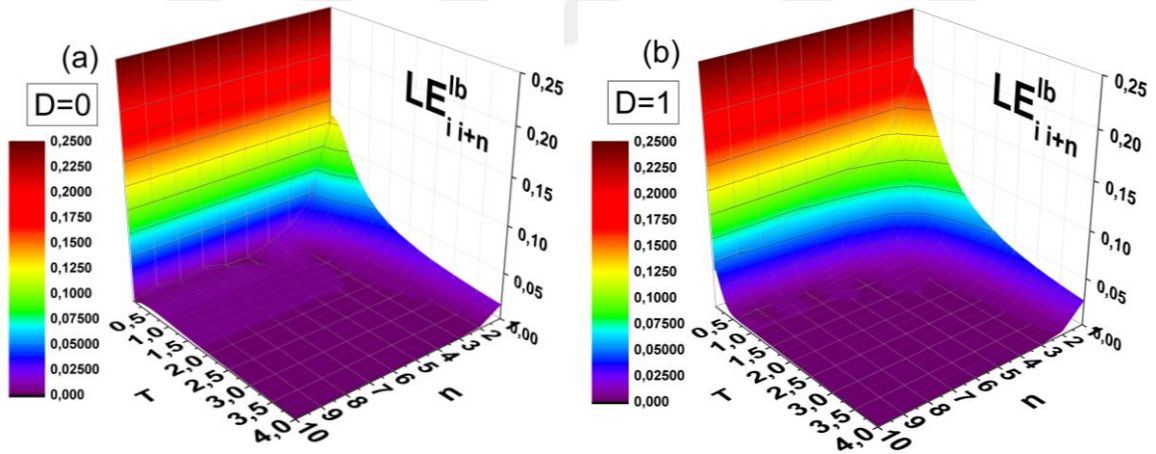
Şekil 3.81. $B_z=5$ harici manyetik alan, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=-1$ değiş-tokuş sabitleri olmak üzere sıcaklığa bağlı olarak $D=0, 1, 2, 4$ için dolaşıklığın üst sınırı

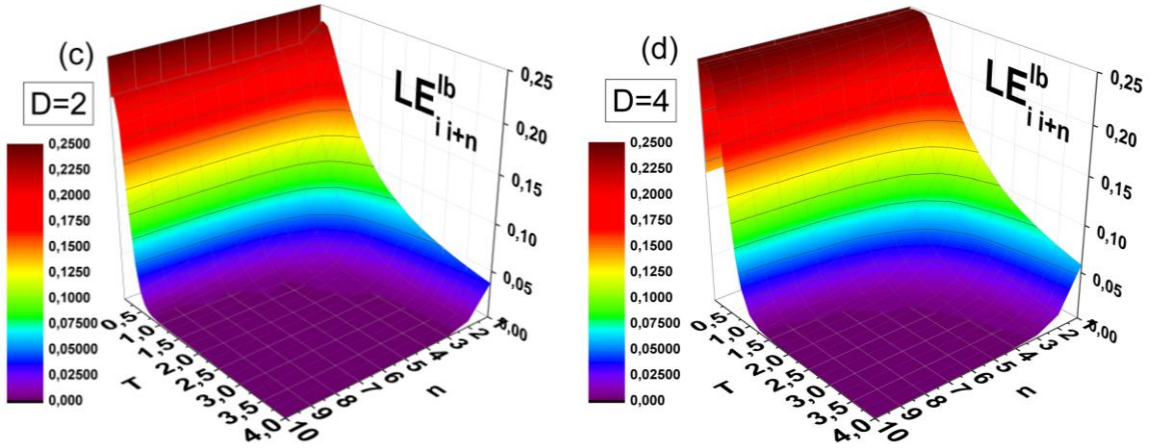
İkinci tip karışık model ve $B_z=0$ 'da, $T=0.1, 0.5, 1, 3.5$ sıcaklıklarında $D=0, 1, 2$ ve 4 için dolaşıklığın alt sınırının n . en yakın komşu spinlere göre davranışı Şekil 3.82 ile verilmektedir. Harici alanın yokluğunda ilk 20 spin değerlendirildiğinde $T=0.1$ sıcaklığında D arttıkça alt sınır da artmaktadır. $D=4$ değerinde tüm spinlerin dolaşıklığın alt sınırının değeri anıdır ($LE(S_1)=LE(S_2)=LE(S_3)=LE(S_4)=\dots=LE(S_{20})$). Dipol-dipol etkileşmesi yokluğunda n arttıkça alt sınır azalmaktadır. $D=1$ için ilk 6 spine kadar n arttıkça alt sınır azalmakta iken $n>6$ için değişmemektedir. $D=2$ için $n>1$ için dolaşıklığın diğer komşu n . spinler için değişmemektedir. $T=0.5$ sıcaklığında ise tüm D değerleri için n arttıkça alt sınırın aldığı değerler azalmaktadır. $D=2$ ve $D=4$ değerlerinde artan n 'e göre yüksek sıcaklıklarda dahi dolaşıklık sönümlenmemekte iken $D=0$ ve $D=1$ için sırasıyla $n=6$ ve $n=11$ komşularında sönümlenmektedir. Artan sıcaklık tüm D değerleri için dolaşıklığın belirli bir n değerinden sonra sönümleniceğini göstermektedir (Şekil 3.82(c) ve Şekil3.82(d)). Tüm sıcaklık değerlerinde artan D 'ye bağlı olarak dolaşıklığın alt sınırı artmaktadır.



Şekil 3.82. En yakın 20 komşu ve $B_z=0$ için dolaşıklığın alt sınırı (a) $T=0.1$ (b) $T=0.5$ (c) $T=1$ (d) $T=3.5$

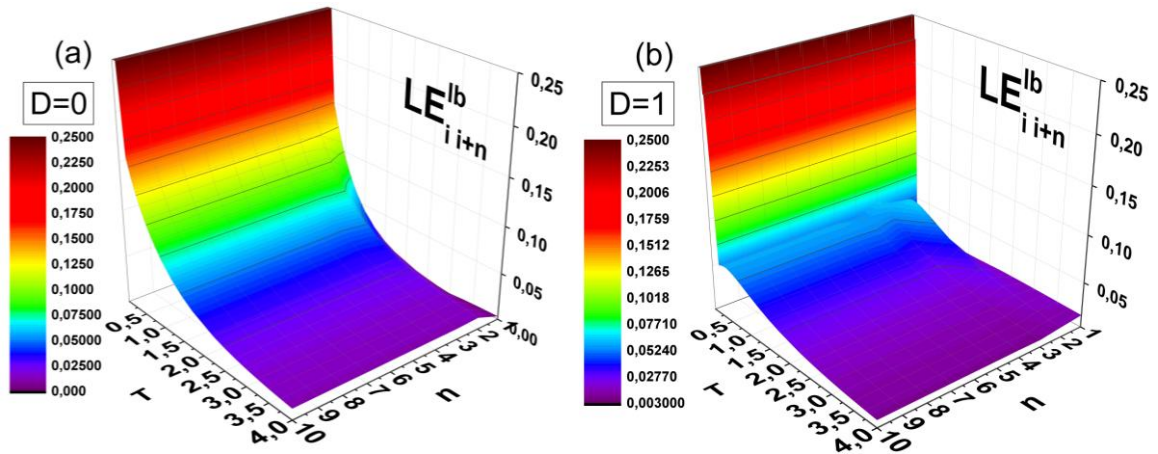
Harici manyetik alan $B_z=0.5$ altında n komşu sayısına göre dolaşıklığın alt sınırının sıcaklıkla değişimi $D=0, 1, 2$ ve 4 için sırasıyla Şekil 3.83 ile verilmektedir. İlk 10 komşu spin $B_z=0.5$ harici alan altında dolaşıklığın alt sınırı düşük sıcaklarda $6 > n > 1$ aralığında n arttıkça sıfıra yaklaşmakta ve $n > 6$ için sıfırdan uzaklaşmaktadır. Ayrıca yüksek sıcaklıklarda sadece en yakın komşu spin için alt sınır sönümlenmemektedir. $1.75 > T > 0.5$ aralığında $10 > n > 4$ komşu spinlerle olan dolaşıklığın alt sınır değerleri sıcaklığa bağlı monoton davranışa uymamaktadır (Şekil 3.83(a)). $D=1$ ise bu alan altında alt sınırın düşük sıcaklıklarda $D=0$ 'a göre daha yüksek değerler aldığını ve 10.komşu spin ile ilk spin arasındaki alt sınırın sönümlenmediğini göstermektedir. Sıcaklığa bağlı monoton davranış mevcudiyetini korurken $1 > T > 0.5$ arasında tek-çift etkisine benzer bir davranışın varlığını tartışmak mümkündür. $n=3,5,7$ ve 9.komşu spinlerde dolaşıklığın alt sınırı sıfıra yaklaşırken çift sayılı komşular için sıfırdan farklıdır. $D=2$ (Şekil 3.83(c)) ve $D=4$ (Şekil 3.83(d)) değerleri için sıcaklığa bağlı davranış monoton ve tek-çift etkisi bulunmamaktadır. Dipol-dipol etkileşmesinin gücü arttıkça düşük sıcaklıklarda daha çok komşu için dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerler artmakla birlikte sönümlenme sıcaklığı da artmıştır.

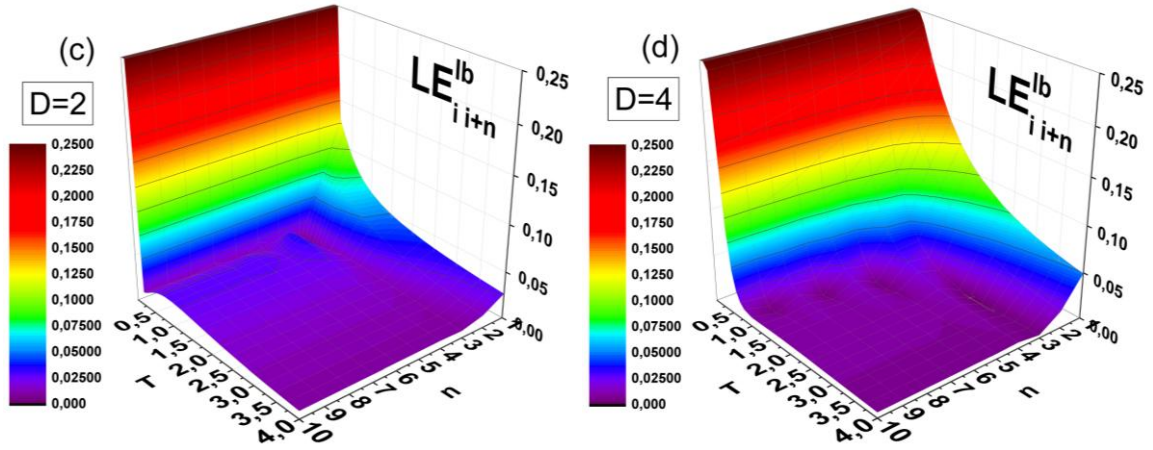




Şekil 3.83. $B_z=0.5$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi

Harici manyetik alan $B_z=2$ altında n . komşu sayısına göre dolaşıklığın alt sınırının sıcaklıkla değişimi $D=0, 1, 2$ ve 4 için sırasıyla Şekil 3.84 ile verilmektedir. Dipol-dipol etkileşmesinin dahil edilmediği durumda düşük sıcaklıklarda n 'in değişimine göre alt sınır değişmemektedir. Sıcaklık arttıkça monoton olarak tüm n komşu spinler için azalmaktadır (Şekil 3.84(a)). $D=1$ değerinde $n=3$ tüm sıcaklıklar için en yüksek alt sınır değerine sahip komşudur. Sıcaklığa bağlı monoton azalma $D=1$ için mevcuttur. $D=2$, $D=1$ 'in aksine $n=3$ 'te alt sınırın sifıra çok yaklaştığı değerdir. Alt sınır n arttıkça $n=3$ 'e kadar azalmakta $n=4$ 'te tekrar artmakta $n>4$ için değişmemektedir.





Şekil 3.84. $B_z=2$ 'de lokalize dolaşıklığın alt sınırının n komşu sayısı ve T sıcaklığına bağlı değişimi

Şekil 3.84 (d) incelendiğinde $D=4$, $n<3$ için alt sınırın aldığı değerlerin diğer D değerlerine oranla en yüksek olduğu değerdir. $B_z=2$ harici alanı altında, dipol-dipol etkileşmesinin gücü arttıkça tek-çift etkisi ve monoton olmayan davranış belirginleşmektedir. Harici alan yükseldikçe güçlü dipol-dipol etkileşmesinin ($D=4$) varlığı bahsi geçen davranış mekanizmalarını güçlendirmektedir.

4. SONUÇLAR

Bölüşüm fonksiyonu, dipol-dipol etkileşmesi dahil edilmiş Heisenberg Hamiltoniyeni kullanarak, $\hat{O}$ operatörü ile elde edilen transfer matrisi yardımıyla hesaplanmıştır. Suzuki-Trotter dekompozisyon yöntemi ve Zassenhaus yaklaşımı beraber kullanılmıştır. Elde edilen $\hat{O}$ operatörü ve dolayısıyla sistemin tüm bilgisini elinde tutan yoğunluk matrisi, üç boyutlu Euclid uzayında kartezyen koordinatlarda çok boyutlu sistemler için kullanılabilecek genel bir ifadedir. Kuantum spin zinciri için yeterli parametreler ışığında, bölüşüm fonksiyonu ve yoğunluk matrisi elde edilmiştir. $D=0$, $J_x=2$, $J_y=1$, $J_z=0$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5$ için ferromanyetik XY modelinde “MATLAB” ortamında nümerik basit türev alınarak, termodinamik nicelikler bölüşüm fonksiyonu Z ’den türetilmiştir. Manyetik alan, manyetik duygunluk ve iç enerjinin sıcaklıkla değişimi literatürdeki sonuçlar ile karşılaştırılmış ve aynı sonuçlara ulaşılmıştır. Sonrasında bu tez çalışmasında incelenen ilk model olan izotropik ferromanyetik modelde spin başına mıknatıslanma ve enerji yoğunluğu $D=0$, $J_x=1$, $J_y=1$, $J_z=1$ değiş-tokuş sabitleri ve $B_z=0.5$ alan için nümerik türev yöntemiyle MATLAB ortamında aynı operatör kullanılarak hesaplanmıştır. Aynı Hamiltoniyen ve spin-1/2 örgüsü ile “ALPS” açık kaynak kodlu açık kaynak kodlu yazılımı (Loop algoritması) kullanılarak termodinamik nicelikler hesaplanmıştır. İki yöntemin verdiği sonuçlar ışığında sistemin davranışında büyük oranda benzerlik bulunmaktadır. Lokalize dolaşıklığın alt ve üst sınırlarının hesaplanmasında Loop algoritması kullanılmıştır.

Yapılan simülasyonlarda farklı J_x , J_y , J_z , D , T ve B_z parametreleri ile hesaplama yapmak için toplam 52 adet iş parçacığı kullanılmıştır. RAM hafızaya, simülasyondan elde edilen sonuçların analizi için ihtiyaç duyulmuştur. Data analizi için “Python 3.6” ve “Bash Scripting” kullanılmıştır. Dolaşıklığın alt ve üst sınırları, sıcaklık T ’ye ve dipol-dipol etkileşmesi D ’ye bağlı olarak incelenmiştir. $B_z=0, 0.5, 1, 2$ ve 5 harici alanları altında $D=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 2$ ve 4 dipol-dipol sabitleri, $T \in [0, 4]$ sıcaklık değerleri için en yakın komşular ve $n=10$ komşu spin için alt ve üst sınır değerleri 4 model için hesaplanmıştır. Bu modeller izotropik ferromanyetik XXX modeli, izotropik antiferromanyetik XXX modeli, karışık AFM-FM XXZ modeli ($J_x=J_y=-1$, $J_z=1$) ve karışık FM-AFM XXZ modelidir ($J_x=J_y=1$, $J_z=-1$).

Ferromanyetik modelde, $B_z=0$ 'da harici alan altında sıcaklığa bağlı monoton olmayan davranış bulunmaktadır. Bu davranış, *uyanış fenomeni* olarak adlandırılır. Ayrıca $D=1$ değerine kadar artan D ile dolaşıklığın alt sınırının aldığı değerler azalmakta; $D>1$ için D arttıkça alt sınırın aldığı değerler artmaktadır (Şekil 3.11). $B_z=0.5$ ve $B_z=1$ harici alanları altında, dipol-dipol etkileşmesinin katkısı (D) arttıkça dolaşıklığın alt sınırı $D = 2$ değerine kadar azalmakta; $D>1$ için artmaktadır (Şekil 3.12). $B_z\geq 2$ harici alan değerlerinde D arttıkça en yakın komşu spinlerin dolaşıklığının alt sınırının aldığı değerler azalmaktadır (Şekil 3.14 ve Şekil 3.15). Üst sınır için tüm harici alanlar altında D arttıkça dolaşıklığın aldığı değer artmaktadır. Harici alanın artışı tüm D ler için üst sınır değerlerini azaltmaktadır (Şekil 3.16-Şekil 3.19). $T=0.1$ çok düşük sıcaklık değerinde $D=4$ için dolaşıklığın alt sınırı en yakın 20 komşu spin için incelendiğinde dolaşıklığın miktarında bir değişiklik olmadığı görülmektedir (Şekil 3.20(a)). $D<4$ için 9.ncu komşudan itibaren alt sınır sıfıra çok yakın değerler almaktadır. Ayrıca D değeri arttıkça uzak dolaşık çiftlerin sayısı azalmaktadır. $T=0.5$ için $n>4$ (Şekil 3.20(b)), $T=1$ 'de $n>5$ (Şekil 3.20(d)) ve $T=3.5$ 'da $n>1$ (Şekil 3.20(c)) için dolaşıklığın alt sınırı neredeyse sıfıra yaklaşmaktadır. Ayrıca $T=0.5$ 'de $D=4$ değerinde alt sınır, $n>11$ 'den sonra sıfıra yaklaşmaktadır. Harici alanın yokluğunda dolaşıklığın alt sınırının en yakın 20 komşu spine göre davranışı gösterilmiştir. $1>D>0$ aralığında artan D değerleri için dolaşıklık miktarı azalmakta iken $4>D>1$ aralığında artan D değerleri için dolaşıklığın miktarı artmaktadır. Bu davranış tüm sıcaklık değerleri için geçerlidir.

Antiferromanyetik modelde en yakın komşularda, $B_z\leq 1$ harici alan değerlerinde, D arttıkça alt sınırın aldığı değerler artmaktadır (Şekil 3.31, Şekil 3.32 ve Şekil 3.33). $B_z=2$ 'de $D=0.75$ 'e kadar, artan D ile alt sınır azalmaktadır (Şekil 3.34). $D>0.75$ için ise D arttıkça alt sınır artmaktadır. $D=0.75$ değeri için uyanış fenomeni gözlenmiştir. Yüksek alan değeri $B_z=5$ 'de işler tersine dönmektedir; D değerleri arttıkça alt sınırın aldığı değerler azalmaktadır (Şekil 3.35). $B_z>0.5$ ten sonra D azaldıkça üst sınır artmaktadır; harici alan değeri arttıkça maksimum sınır değerleri azalmaktadır (Şekil 3.37, Şekil 3.38 ve Şekil 3.39). Diğer harici alan değerlerinde ise alt sınır, üst üste binerek sıcaklığa göre değişiklik göstermemektedir (Şekil 3.36). Diğer komşu spinler için değerlendirme yapıldığında, $B_z=0$ 'da tüm sıcaklıklarda alt sınır artan D ile azalmaktadır (Şekil 3.40). Bununla birlikte sıcaklığın artışıyla alt sınırın aldığı değerler uzak spine göre azalmaktadır. Çok düşük sıcaklıklarda ise belirli bir n .komşudan

itibaren dolaşıklığın alt sınırı değişmemektedir. $B_z=0.5$ için D arttıkça uzaklığa göre alt sınır değerleri artmaktadır. $D=0$ için uyanış fenomeni; $D=1$ tek-çift etkisine benzer etki görülmektedir. $B_z=2$ için $D=2$ te uyanış fenomeni (Şekil 3.42(c)); $D=4$ te hem uyanış fenomeni hem de tek-çift etkisine benzer etki görülmektedir (Şekil 3.42(d)).



KAYNAKÇA

- Androvitsaneas, P., Fytas, N. G., Paspalakis, E., & Terzis, A. F. (2012). Quantum Monte Carlo simulations revisited: The case of anisotropic Heisenberg chains. *Philosophical Magazine*, 92(36), 4649–4656. <https://doi.org/10.1080/14786435.2012.716200>
- Androvitsaneas, P., Paspalakis, E., & Terzis, A. F. (2012). A quantum Monte Carlo study of the localizable entanglement in anisotropic ferromagnetic Heisenberg chains. *Annals of Physics*, 327(2), 212–223.
- Androvitsaneas, P., Terzis, A. F., & Paspalakis, E. (2013). Localizable entanglement in antiferromagnetic and mixed Heisenberg chains: a quantum Monte Carlo study. *Quantum Information Processing*, 1–10.
- Ansmann, M., Wang, H., Bialczak, R. C., Hofheinz, M., Lucero, E., Neeley, M., ... Martinis, J. M. (2009). Violation of Bell's inequality in Josephson phase qubits. *Nature*, 461(7263), 504–506. Retrieved from <http://dx.doi.org/10.1038/nature08363>
- Arnesen, M. C., Bose, S., & Vedral, V. (2001). Natural thermal and magnetic entanglement in the 1D Heisenberg model. *Physical Review Letters*, 87(1), 17901.
- Arunan, E. (2010). Peter Debye. *Resonance*, 15(12), 1056–1059.
- Aspect, A., Dalibard, J., & Roger, G. (1982). Experimental test of Bell's inequalities using time-varying analyzers. *Physical Review Letters*, 49(25), 1804.
- Aspect, A., Grangier, P., & Roger, G. (1981). Experimental tests of realistic local theories via Bell's theorem. *Physical Review Letters*, 47(7), 460.
- Barma, M., & Shastry, B. S. (1978). Classical equivalents of one-dimensional quantum-mechanical systems. *Physical Review B*, 18(7), 3351.
- Bell, J. S. (1964). On the einstein podolsky rosen paradox.
- Bennett, C. H., Brassard, G., Popescu, S., Schumacher, B., Smolin, J. A., & Wootters, W. K. (1996). Purification of Noisy Entanglement and Faithful Teleportation via Noisy Channels. *Physical Review Letters*, 76(5), 722–725. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.722>

- Bennett, C. H., & DiVincenzo, D. P. (2000). Quantum information and computation. *Nature*, 404(6775), 247.
- Bennett, C. H., DiVincenzo, D. P., Smolin, J. A., & Wootters, W. K. (1996). Mixed-state entanglement and quantum error correction. *Physical Review A*, 54(5), 3824–3851. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.54.3824>
- Briegel, H. J., & Raussendorf, R. (2001). Persistent entanglement in arrays of interacting particles. *Physical Review Letters*, 86(5), 910.
- Cancio, A., & Chang, Y.-C. (1995). Polyexcitons and Bound Multiple Excitons in Semiconductors Studied by Quantum Monte Carlo Methods+. *Chinese Journal of Physics*, 33(4), 335–361.
- Christensen, B. G., McCusker, K. T., Altepeter, J. B., Calkins, B., Gerrits, T., Lita, A. E., ... Nam, S. W. (2013). Detection-loop-hole-free test of quantum nonlocality, and applications. *Physical Review Letters*, 111(13), 130406.
- Clauser, J. F., & Horne, M. A. (1974). Experimental consequences of objective local theories. *Physical Review D*, 10(2), 526.
- Clauser, J. F., Horne, M. A., Shimony, A., & Holt, R. A. (1969). Proposed experiment to test local hidden-variable theories. *Physical Review Letters*, 23(15), 880.
- Cohen, O. (1998). Unlocking hidden entanglement with classical information. *Physical Review Letters*, 80(11), 2493.
- De Raedt, H., & De Raedt, B. (1983). Applications of the generalized Trotter formula. *Physical Review A*, 28(6), 3575.
- Devetak, I., & Winter, A. (2004). Distilling common randomness from bipartite quantum states. *IEEE Transactions on Information Theory*, 50(12), 3183–3196.
- DiVincenzo, D. P., Fuchs, C. A., Mabuchi, H., Smolin, J. A., Thapliyal, A., & Uhlmann, A. (1999). Entanglement of assistance. *Lecture Notes in Computer Science*, 247–257.
- Eggert, S., Affleck, I., & Takahashi, M. (1994). Susceptibility of the spin 1/2 Heisenberg antiferromagnetic chain. *Physical Review Letters*, 73(2), 332.
- Einstein, A., Podolsky, B., & Rosen, N. (1935). Can quantum-mechanical description of

- physical reality be considered complete? *Physical Review*, 47(10), 777.
- Evertz, H. G., Lana, G., & Marcu, M. (1993). Cluster algorithm for vertex models. *Physical Review Letters*, 70(7), 875.
- Evertz, H. G., & Marcu, M. (1993). The loop-cluster algorithm for the case of the 6 vertex model. *Nuclear Physics B-Proceedings Supplements*, 30, 277–280.
- Fortuin, C. M. (1969). *Physica* (Utrecht) 57, 536 (1972); PW Kasteleyn and CM Fortuin. *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl*, 26(11).
- Fortuin, C. M., & Kasteleyn, P. W. (1972). On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models. *Physica*, 57(4), 536–564.
- Freedman, S. J., & Clauser, J. F. (1972). Experimental test of local hidden-variable theories. *Physical Review Letters*, 28(14), 938.
- Giustina, M., Mech, A., Ramelow, S., Wittmann, B., Kofler, J., Beyer, J., ... Zeilinger, A. (2013). Bell violation using entangled photons without the fair-sampling assumption. *Nature*, 497(7448), 227–230. Retrieved from <http://dx.doi.org/10.1038/nature12012>
- Groblacher, S., Paterek, T., Kaltenbaek, R., Brukner, C., Zukowski, M., Aspelmeyer, M., & Zeilinger, A. (2007). An experimental test of non-local realism. *Nature*, 446(7138), 871–875. Retrieved from <http://dx.doi.org/10.1038/nature05677>
- Hammar, P. R., Stone, M. B., Reich, D. H., Broholm, C., Gibson, P. J., Turnbull, M. M., ... Oshikawa, M. (1999). Characterization of a quasi-one-dimensional spin-1/2 magnet which is gapless and paramagnetic for $g \mu_B H \lesssim J$ and $k_B T \ll J$. *Physical Review B*, 59(2), 1008.
- Handscomb, D. C. (1964). A Monte Carlo method applied to the Heisenberg ferromagnet. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* (Vol. 60, pp. 115–122). Cambridge University Press.
- Handsteiner, J., Friedman, A. S., Rauch, D., Gallicchio, J., Liu, B., Hosp, H., ... Leung, C. (2017). Cosmic Bell test: measurement settings from milky way stars. *Physical Review Letters*, 118(6), 60401.
- Harada, K., & Kawashima, N. (2001). Loop algorithm for Heisenberg models with biquadratic interaction and phase transitions in two dimensions. *Journal of the*

- Physical Society of Japan*, 70(1), 13–16.
- Harrison, E. R. (2000). Book Review: Cosmology: the science of the universe.- /Cambridge U Press, 2000. *Irish Astronomical Journal*, 27, 235.
- helge krack. (2002). *Quantum Generations: A History of Physics in the Twentieth Century*. Princeton, New Jersey, USA: Princeton University Press.
- Hirsch, J. E., Sugar, R. L., Scalapino, D. J., & Blankenbecler, R. (1982). Monte Carlo simulations of one-dimensional fermion systems. *Physical Review B*, 26(9), 5033.
- Huang, Y.-Z., & Su, G. (2017). Quantum Monte Carlo study of the spin-1/2 honeycomb Heisenberg model with mixed antiferromagnetic and ferromagnetic interactions in external magnetic fields. *Physical Review E*, 95(5), 52147.
- Hughston, L., Jozsa, R., & K. Wootters, W. (1993). A complete classification of quantum ensembles having a given density matrix. *Physics Letters A* (Vol. 183). [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(93\)90880-9](https://doi.org/10.1016/0375-9601(93)90880-9)
- Jian-Wei, P. A. N., Bouwmeester, D., Daniell, M., Weinfurter, H., & Zeilinger, A. (2000). Experimental test of quantum nonlocality in three-photon Greenberger-Horne-Zeilinger entanglement. *Nature*, 403(6769), 515.
- Jin, B.-Q., & Korepin, V. E. (2004). Localizable entanglement in antiferromagnetic spin chains. *Physical Review A*, 69(6), 62314. Retrieved from <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.69.062314>
- Joyce, G. S. (1972). Phase Transitions and Critical Phenomena. Ed. Domb, C. and Green, MS, Academic, New-York, 375.
- Kamta, G. L., & Starace, A. F. (2002). Anisotropy and magnetic field effects on the entanglement of a two qubit Heisenberg XY chain. *Physical Review Letters*, 88(10), 107901.
- Kawashima, N., Gubernatis, J. E., & Evertz, H. G. (1994). Loop algorithms for quantum simulations of fermion models on lattices. *Physical Review B*, 50(1), 136.
- Laustsen, T., Verstraete, F., & Van Enk, S. J. (2003). Local vs. joint measurements for the entanglement of assistance. *Quantum Information & Computation*, 3(1), 64–83.
- Lidar, D. A., Bacon, D., & Whaley, K. B. (1999). Concatenating decoherence-free

- subspaces with quantum error correcting codes. *Physical Review Letters*, 82(22), 4556.
- Loh Jr, E. Y., Gubernatis, J. E., Scalettar, R. T., White, S. R., Scalapino, D. J., & Sugar, R. L. (1990). Sign problem in the numerical simulation of many-electron systems. *Physical Review B*, 41(13), 9301.
- Magnus, W. (1954). On the exponential solution of differential equations for a linear operator. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 7(4), 649–673.
- Mehra, J., Rechenberg, H. (1982). *The historical development of quantum theory*. New York, USA: Springer-Verlag Inc.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., & Teller, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6), 1087–1092.
- O’connor, K. M., & Wootters, W. K. (2001). Entangled rings. *Physical Review A*, 63(5), 52302.
- Planck Max. (1900). The historical development of quantum theory. *Ann. D. Phys.*, 1, 719.
- Rosenfeld, W., Burchardt, D., Garthoff, R., Redeker, K., Ortegel, N., Rau, M., & Weinfurter, H. (2017). Event-Ready Bell Test Using Entangled Atoms Simultaneously Closing Detection and Locality Loopholes. *Physical Review Letters*, 119(1), 10402.
- Rowe, M. A., Kielpinski, D., Meyer, V., & Sackett, C. A. (2001). Experimental violation of a Bell’s inequality with efficient detection. *Nature*, 409(6822), 791.
- Sakurai, J. J., & Commins, E. D. (1995). *Modern quantum mechanics*, revised edition. AAPT.
- Salart Subils, D., Baas, A., Van Houwelingen, J., Gisin, N., & Zbinden, H. (2008). Spacelike separation in a Bell test assuming gravitationally induced collapses. *Physical Review Letters*, 100(220404), 4.
- Sandvik, A. W. (1992). A generalization of Handscomb’s quantum Monte Carlo scheme-application to the 1D Hubbard model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 25(13), 3667.

- Sandvik, A. W. (1997). Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional Heisenberg model. *Physical Review B*, 56(18), 11678.
- Sandvik, A. W., & Kurkijärvi, J. (1991). Quantum Monte Carlo simulation method for spin systems. *Physical Review B*, 43(7), 5950.
- Scalettar, R. T. (1998). World-line quantum Monte Carlo. *Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry*, 525, 65.
- Suzuki, M. (1976a). Generalized Trotter's formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems. *Communications in Mathematical Physics*, 51(2), 183–190.
- Suzuki, M. (1976b). Relationship between d-dimensional quantal spin systems and (d+1)-dimensional Ising systems: Equivalence, critical exponents and systematic approximants of the partition function and spin correlations. *Progress of Theoretical Physics*, 56(5), 1454–1469.
- Suzuki, M. (1977). On the convergence of exponential operators—the Zassenhaus formula, BCH formula and systematic approximants. *Communications in Mathematical Physics*, 57(3), 193–200.
- Suzuki, M., Miyashita, S., & Kuroda, A. (1977). Monte Carlo simulation of quantum spin systems. I. *Progress of Theoretical Physics*, 58(5), 1377–1387.
- Swendsen, R. H., & Wang, J.-S. (1987). Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. *Physical Review Letters*, 58(2), 86.
- Tittel, W., Brendel, J., Gisin, B., Herzog, T., Zbinden, H., & Gisin, N. (1998). Experimental demonstration of quantum correlations over more than 10 km. *Physical Review A*, 57(5), 3229.
- Tittel, W., Brendel, J., Zbinden, H., & Gisin, N. (1998). Violation of Bell inequalities by photons more than 10 km apart. *Physical Review Letters*, 81(17), 3563.
- Trotter, H. F. (1959). An elementary proof of the central limit theorem. *Archiv Der Mathematik*, 10(1), 226–234.
- Trotter, H. F. (1959). On the product of semi-groups of operators. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 10(4), 545–551.

- Van Hove, L. (1958). Von Neumann's contributions to quantum theory. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 64(3), 95–99.
- Verstraete, F., Popp, M., & Cirac, J. I. (2004). Entanglement versus correlations in spin systems. *Physical Review Letters*, 92(2), 27901.
- Wang, X. (2001). Entanglement in the quantum Heisenberg XY model. *Physical Review A*, 64(1), 12313.
- Wang, X. (2002). Threshold temperature for pairwise and many-particle thermal entanglement in the isotropic Heisenberg model. *Physical Review A*, 66(4), 44305.
- Weihs, G., Jennewein, T., Simon, C., Weinfurter, H., & Zeilinger, A. (1998). Violation of Bell's inequality under strict Einstein locality conditions. *Physical Review Letters*, 81(23), 5039.
- Wootters, W. K. (1998). Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Physical Review Letters*, 80(10), 2245.
- Zassenhaus, H. (1939). Über Lie'sche Ringe mit Primzahlcharakteristik. In *Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg* (Vol. 13, pp. 1–100). Springer.
- Zheng, S.-B., & Guo, G.-C. (2000). Efficient scheme for two-atom entanglement and quantum information processing in cavity QED. *Physical Review Letters*, 85(11), 2392.
- Zhou, L., Song, H. S., Guo, Y. Q., & Li, C. (2003). Enhanced thermal entanglement in an anisotropic Heisenberg XYZ chain. *Physical Review A*, 68(2), 24301.

EK – A

$$A_1 = \frac{1}{2} (e^{K_z} \cosh(2K_f) \cosh(K_x - K_y) + e^{-K_z} \cosh(2K_f) \cosh(K_x + K_y))$$

$$A_2 = \frac{1}{2} e^{K_x} \sinh(2K_f) \cosh(K_x - K_y)$$

$$A_3 = \cosh(K_x) \cosh(K_y) \cosh(K_z) - \frac{1}{4} \sinh(K_x) \sinh(K_y) (e^{K_z-2K_f} + e^{K_z+2K_f} + 2e^{-K_z})$$

$$A_4 = -\frac{1}{4} \sinh(K_y) \cosh(K_x) (e^{K_z-2K_f} + e^{K_z+2K_f} - 2e^{-K_z})$$

$$A_5 = \frac{1}{2} (e^{K_z} \cosh(2K_f) \sinh(K_y - K_x) + e^{-K_z} \sinh(K_y + K_x))$$

$$A_6 = \frac{i}{2} e^{K_z} \sinh(K_f) \sinh(K_y) \cosh(K_x)$$

$$B_1 = \cosh^2(T_{xy}) \cosh^2(T_{xz}) \cosh^2(T_{yz}) - \sinh^2(T_{xy}) \sinh^2(T_{xz}) \sinh^2(T_{yz})$$

$$B_2 = \frac{i}{4} \left(\sinh(2T_{yz}) \left(\cosh(2T_{xz}) - \cosh(2T_{xy}) \right) + \sinh(2T_{xy}) \sinh(2T_{xz}) \cosh(2T_{yz}) \right)$$

$$B_3 = \frac{i}{4} \left(\sinh(2T_{xz}) \left(\cosh(2T_{xy}) \cosh(2T_{yz}) - 1 \right) - \sinh(2T_{xy}) \sinh(2T_{yz}) \right)$$

$$B_4 = \frac{i}{4} \left(\sinh(2T_{xy}) \left(\cosh(2T_{xz}) - \cosh(2T_{yz}) \right) + \sinh(2T_{xy}) \sinh(2T_{xz}) \sinh(2T_{yz}) \right)$$

$$B_5 = \cosh^2(T_{xy}) \cosh^2(T_{xz}) \sinh^2(T_{yz}) - \sinh^2(T_{xy}) \sinh^2(T_{xz}) \cosh^2(T_{yz}) - \frac{1}{2} \sinh(2T_{xy}) \sinh(2T_{xz}) \sinh(2T_{yz})$$

$$B_6 = \cosh^2(T_{xy})\sinh^2(T_{xz})\cosh^2(T_{yz}) - \sinh^2(T_{xy})\cosh^2(T_{xz})\sinh^2(T_{yz}) \\ + \frac{1}{2}\sinh(2T_{xy})\sinh(2T_{xz})\sinh(2T_{yz})$$

$$B_7 = -\cosh^2(T_{xy})\sinh^2(T_{xz})\sinh^2(T_{yz}) + \sinh^2(T_{xy})\sinh^2(T_{xz})\cosh^2(T_{yz}) \\ - \frac{1}{4}\sinh(2T_{xy})\sinh(2T_{xz})\sinh(2T_{yz})$$

$$B_8 = \frac{1}{4}\left(\sinh(2T_{xy})\left(\cosh(2T_{xz}) + \cosh(2T_{yz})\right) \right. \\ \left. - \cosh(2T_{xy})\sinh(2T_{xz})\sinh(2T_{yz})\right)$$

$$B_9 = \frac{1}{4}\left(\sinh(2T_{xz})\left(\cosh(2T_{xy})\cosh(2T_{yz}) + 1\right) - \sinh(2T_{xy})\sinh(2T_{yz})\right)$$

$$B_{10} = \frac{1}{4}\left(\sinh(2T_{yz})\left(\cosh(2T_{xy}) + \cosh(2T_{xz})\right) \right. \\ \left. - \sinh(2T_{xy})\sinh(2T_{xz})\cosh(2T_{yz})\right)$$

$$C_{1r} = -K_f T_{xz}$$

$$C_{1i} = T_{yz}(K_z - K_y)$$

$$C_{2r} = -K_f T_{yz}$$

$$C_{2i} = T_{xz}(K_z - K_x)$$

$$C_3 = T_{xy}(K_y + K_x)$$

$$C_4 = -2K_f T_{xy}$$

$$C_5 = -K_z T_{xy}$$

$$C_6 = K_f T_{yz} - K_y T_{xz}$$

$$C_7 = -K_f T_{xz}$$

EK – B

$$O_1 = \cosh(K_z) \cosh(g_{xy} K_f) \cosh(K_f) \cosh(K_x) \cosh(T_{xy})$$

$$O_2 = \sinh(K_z) \cosh(g_{xy} K_f) \cosh(K_f) \cosh(K_x) \cos(T_{xy})$$

$$O_3 = (\cosh(K_z) + \sinh(K_z) / 4) \cos(T_{xy}) \cosh(K_x) \cosh(g_{xy} K_f) \sinh(K_f) \cosh(T_{xy})$$

$$O_4 = (\cosh(K_z) + \sinh(K_z) / 4) \cosh(K_x) [\cos(T_{xy}) e^{K_f} \sinh(g_{xy} K_f) \\ + \sin(T_{xy}) e^{-K_f} \cosh(g_{xy} K_f)]$$

$$O_5 = (\cosh(K_z) + \sinh(K_z) / 4) \cosh(K_x) [\cos(T_{xy}) e^{-K_f} \sinh(g_{xy} K_f) \\ - \sin(T_{xy}) e^{K_f} \cosh(g_{xy} K_f)]$$

$$O_6 = (\cosh(K_z) - \sinh(K_z) / 4) \cos(T_{xy}) \cosh(g_{xy} K_f) \cosh(K_f) \sinh(K_x)$$

$$O_7 = -(\cosh(K_z) + \sinh(K_z) / 4) \sin(T_{xy}) \cosh(K_x) \sinh(g_{xy} K_f) e^{K_f}$$

$$O_8 = (\cosh(K_z) + \sinh(K_z) / 4) \sin(T_{xy}) \cosh(K_x) \sinh(g_{xy} K_f) e^{-K_f}$$

EK – C

$$W(1) = w_1 = \langle \uparrow\uparrow | \hat{O} | \uparrow\uparrow \rangle = O_1 + 2O_4 + O_7$$

$$W(2) = w_2 = \langle \uparrow\uparrow | \hat{O} | \uparrow\downarrow \rangle = O_9 - iO_{10}$$

$$W(3) = w_3 = \langle \uparrow\uparrow | \hat{O} | \downarrow\uparrow \rangle = O_9 - iO_{10}$$

$$W(4) = w_4 = \langle \uparrow\uparrow | \hat{O} | \downarrow\downarrow \rangle = O_5 - O_6 + 2iO_8$$

$$W(5) = w_5 = \langle \uparrow\downarrow | \hat{O} | \uparrow\uparrow \rangle = O_9 + iO_{10}$$

$$W(6) = w_6 = \langle \uparrow\downarrow | \hat{O} | \uparrow\downarrow \rangle = O_1 - O_7$$

$$W(7) = w_7 = \langle \uparrow\downarrow | \hat{O} | \downarrow\uparrow \rangle = O_1 - O_7$$

$$W(8) = w_8 = \langle \uparrow\downarrow | \hat{O} | \downarrow\downarrow \rangle = O_9 - iO_{10}$$

$$W(9) = w_9 = \langle \downarrow\uparrow | \hat{O} | \uparrow\uparrow \rangle = O_9 + iO_{10}$$

$$W(10) = w_{10} = \langle \downarrow\uparrow | \hat{O} | \uparrow\downarrow \rangle = O_5 + O_6$$

$$W(11) = w_{11} = \langle \downarrow\uparrow | \hat{O} | \downarrow\uparrow \rangle = O_5 + O_6$$

$$W(12) = w_{12} = \langle \downarrow\uparrow | \hat{O} | \downarrow\downarrow \rangle = O_9 - iO_{10}$$

$$W(13) = w_{13} = \langle \downarrow\downarrow | \hat{O} | \uparrow\uparrow \rangle = O_5 - O_6 + 2iO_8$$

$$W(14) = w_{14} = \langle \downarrow\downarrow | \hat{O} | \uparrow\downarrow \rangle = -(O_9 + iO_{10})$$

$$W(15) = w_{15} = \langle \downarrow\downarrow | \hat{O} | \downarrow\uparrow \rangle = -(O_9 + iO_{10})$$

$$W(16) = w_{16} = \langle \downarrow\downarrow | \hat{O} | \downarrow\downarrow \rangle = O_1 - 2O_4 + O_7$$

EK – D

$$W(1) = w_1 = \langle \uparrow\uparrow | \hat{O} | \uparrow\uparrow \rangle = o_1 + \frac{o_2}{4} + o_3 + o_8$$

$$W(2) = w_2 = \langle \uparrow\uparrow | \hat{O} | \uparrow\downarrow \rangle = 0$$

$$W(3) = w_3 = \langle \uparrow\uparrow | \hat{O} | \downarrow\uparrow \rangle = 0$$

$$W(4) = w_4 = \langle \uparrow\uparrow | \hat{O} | \downarrow\downarrow \rangle = o_4$$

$$W(5) = w_5 = \langle \uparrow\downarrow | \hat{O} | \uparrow\uparrow \rangle = 0$$

$$W(6) = w_6 = \langle \uparrow\downarrow | \hat{O} | \uparrow\downarrow \rangle = o_1 - \frac{o_2}{4}$$

$$W(7) = w_7 = \langle \uparrow\downarrow | \hat{O} | \downarrow\uparrow \rangle = o_6$$

$$W(8) = w_8 = \langle \uparrow\downarrow | \hat{O} | \downarrow\downarrow \rangle = 0$$

$$W(9) = w_9 = \langle \downarrow\uparrow | \hat{O} | \uparrow\uparrow \rangle = 0$$

$$W(10) = w_{10} = \langle \downarrow\uparrow | \hat{O} | \uparrow\downarrow \rangle = o_6$$

$$W(11) = w_{11} = \langle \downarrow\uparrow | \hat{O} | \downarrow\uparrow \rangle = o_1 - \frac{o_2}{4}$$

$$W(12) = w_{12} = \langle \downarrow\uparrow | \hat{O} | \downarrow\downarrow \rangle = 0$$

$$W(13) = w_{13} = \langle \downarrow\downarrow | \hat{O} | \uparrow\uparrow \rangle = o_5$$

$$W(14) = w_{14} = \langle \downarrow\downarrow | \hat{O} | \uparrow\downarrow \rangle = 0$$

$$W(15) = w_{15} = \langle \downarrow\downarrow | \hat{O} | \downarrow\uparrow \rangle = 0$$

$$W(16) = w_{16} = \langle \downarrow\downarrow | \hat{O} | \downarrow\downarrow \rangle = o_1 + \frac{o_2}{4} - o_3 + o_7$$

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : İzzet Paruğ DURU
Doğum Yeri ve Tarihi : Kadıköy – 01.07.1983
Yabancı Dili : İngilizce (ÜDS: 77)
E-Posta : parugduru@gmail.com
Askerlik Durumu : Yapıldı

Öğrenim Durumu

Derece	Bölüm/Program	Üniversite/Lise	Mezuniyet Yılı
Lise	Fen	Özel Doğan Anadolu Lisesi	2000
Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniversitesi	2008
Yüksek Lisans	Fizik	Marmara Üniversitesi	2011
Doktora	Fizik	Marmara Üniversitesi	2017

İş Deneyimi

Görev	Bölüm	Üniversite/Lise/Kurum	Yıl
Ar-Ge Sorumlusu	Ar-Ge Departmanı	SIT Bilişim Teknolojileri San. ve Tic. Ltd. Şti.	2009-2011
Öğretim Görevlisi	Tıbbi Görüntüleme Programı/MYO	Gedik Üniversitesi	2012-2014
Ar-Ge Sorumlusu	Ar-Ge Departmanı	SIT Bilişim Teknolojileri San. ve Tic. Ltd. Şti.	2015-2017

Yüksek Lisans Tez Başlığı ve Tez Danışmanı:

Tez Başlığı: XY TÜRÜ İNCE FİLM OLUŞUMUNUN MONTE CARLO METODU İLE SİMÜLASYONU

Tez Danışmanı: Prof.Dr.Şahin AKTAŞ

Doktora Tez Başlığı ve Tez Danışmanı:

Tez Başlığı: ÇOK BOYUTLU KUANTUM SİSTEMLERDE KUANTUM MONTE CARLO ALGORTİMALARI KULLANILARAK DOLAŞIKLIĞIN ÖLÇÜLMESİ

Tez Danışmanı: Prof.Dr.Şahin AKTAŞ

Bilimsel Eserler:

Uluslararası hakemli dergilerde yayınlanan makeleler:

Zararsız G, Göksülük D, Korkmaz S, Eldem V, Ertürk Zararsız G, Duru İP, Öztürk A. (2017) A comprehensive simulation study on classification of RNA-Seq data. Plos ONE

İ. P. DURU, C. DEGER, V. ELDEM, T. KALAYCI & S. AKTAS, Theory of room temperature ferromagnetism in Cr modified DNA nanowire, JOURNAL OF PHYSICS D-APPLIED PHYSICS, 2016, 0022-3727, 49, 13.

İ. P. DURU, C. DEGER, T. KALAYCI & M. ARUCU, A computational study on magnetic effects of Zn_{1-x}Cr_xO type diluted magnetic semiconductor, JOURNAL OF MAGNETISM AND MAGNETIC MATERIALS, 2015, 0304-8853, 396, 268-274.

MLSeq package: Machine Learning Interface to RNA-Seq Data Gokmen Zararsiz, Dincer Goksuluk, Selcuk Korkmaz, Vahap Eldem, Izzet Parug Duru, **Turgay Unver**, Ahmet Ozturk, Bioconductor Package 2014 <http://www.bioconductor.org/packages/devel/bioc/vignettes/MLSeq/inst/doc/MLSeq.pdf>

Uluslararası bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitabında (Proceedings) basılan bildiriler:

Caner DEĞER, İzzet Paruğ DURU, Taner KALAYCI, İlhan YAVUZ, ORIGIN OF MAGNETISM IN CR⁺³ DOPED GRAPHENE, Poster Sunumu, TFD33; TÜRK FİZİK DERNEĞİ 33TH ULUSLARARASI FİZİK KONGRESİ, 6-10/9/2017, 631.

Taner KALAYCI, İzzet Paruğ DURU, Caner DEĞER, İlhan YAVUZ, MAGNETIC PROPERTIES OF Co DOPED GRAPHENE: A MONTE-CARLO STUDY, Poster Sunumu, TFD33; TÜRK FİZİK DERNEĞİ 33TH ULUSLARARASI FİZİK KONGRESİ, 6-10/9/2017, 626.

İ.P. DURU, Caner DEĞER, Ş. AKTAŞ, Quantum Monte Carlo Simulaton of Localizable Entanglement on AFM and mixed Heisenberg XXZ Chains, Poster Sunumu, TFD33; TÜRK FİZİK DERNEĞİ 33TH ULUSLARARASI FİZİK KONGRESİ, 6-10/9/2017, 724.

Zararsız G., Eldem V., Korkmaz S., Göksülük D., Duru İ.P., Unver T., Karabulut E., Öztürk A., "Diagonal Discriminant Analysis For Gene-Expression Based Tumor Classification", International Conference on Bioinformatics and Computational Biology (ICBCB 2015), Hong Kong, HONGKONG, 12-13 Mart 2015, pp.1-5

T. KALAYCI, C. DEGER, İ. P. DURU, THEORETICAL STUDY OF THE MAGNETIC DIFFERENCIES OF CR AND CO ION-MODIFIED DNA THIN FILMS, Poster Sunumu, ISSTC 2015, INTERNATIONAL SEMICONDUCTOR SCIENCE AND TECHNOLOGY, 11 Mayıs 2015, 11 Mayıs 2015.

İ. P. DURU, C. DEGER, T. KALAYCI, A STUDY OF DETERMİNİNG MAGNETİC EFFECTS ON ZN1-XCRXO TYPE DİLUTED MAGNETİC SEMİCONDUCTORS, Poster Sunumu, TFD2014; TÜRK FİZİK DERNEĞİ 31TH ULUSLARARASI FİZİK KONGRESİ, 21 Temmuz 2014, 21 Temmuz 2014, 384.

İ. P. DURU, Ş. AKTAŞ, DETECTION OF LOCALİZABLE ENTANGLEMENT ON FERROMAGNETİC HEİSENBERG CHAİN: A QUANTUM MONTE CARLO STUDY, Poster Sunumu, TFD2014; TÜRK FİZİK DERNEĞİ 31TH ULUSLARARASI FİZİK KONGRESİ, 21 Temmuz 2014, 21 Temmuz 2014, 383.

İ.P. DURU, M. EGE, E. COŞGUN, T. PEKTÜRK, H. KORKMAZ, PULSE OKSİMETRE İLE ARTERİYEL AKTİVİTEYE BAĞLI HEMOGLOBİN YOĞUNLUĞU DEĞİŞİMİNİN ANALİZİ, Sözlü Sunum, 9TH ULUSLARARASI SPORDA BİLGİSAYAR BİLİMLERİ SEMPOZYUMU, 19 Haziran 2013, 19 Haziran 2013.

İ. P. DURU, M. ARUCU, Ş. AKTAŞ, SİZE EFFECT ON MAGNETİC STABİLİTY OF NANO-PARTİCLES, Sözlü Sunum, 3RD ULUSLARARASI SÜPERİLETKENLİK VE MANYETİZMA KONFERANSI, 29 Nisan 2012, 29 Nisan 2012.

İ. P. DURU, Ş. AKTAŞ, XY TİPİ İNCE FİLM OLUŞUMUNA ALTLIĞIN ETKİSİNİN MONTE CARLO SİMÜLASYON METODU İLE İNCELENMESİ, Poster Sunumu, TÜRK FİZİK DERNEĞİ 27TH ULUSLARARASI FİZİK KONGRESİ, 06 Eylül 2011, 06 Eylül 2011.

İ. P. DURU, Ş. AKTAŞ, MONTE CARLO SIMULATION OF THIN FILM GROWTH WITH CRYSTALLIZATION, Poster Sunumu, ISCSE2011; 2ND INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPUTATIONAL SCIENCE& ENGINEERING, 01 Haziran 2011, 01 Haziran 2011, 1, 1, 1106 - 1111.

Yazılan uluslararası kitaplar veya kitaplarda bölümler:

Vahap Eldem, Gökmen Zararsız, Tunahan Taşçı, İzzet Paruğ Duru, Yakup Bakır and Melike Erkan (2017). Transcriptome analysis for non-model organism: current status and best-practices, Applications of RNA-Seq and Omics Strategies- From Microorganisms to Human Health, ... (Ed.), InTech, DOI: ...

Caner Değer, Vahap Eldem and İzzet Paruğ Duru (2017). Diluted Magnetic DNA Nanowires, Nanowires - New Insights, Dr. Khan Maaz (Ed.), InTech, DOI: 10.5772/67921.

Ulusal bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitabında basılan bildiriler:

C. DEGER, İ. P. DURU, T. KALAYCI, ZN_{1-x}MN_xO İNCE FİMLERİN MONTE-CARLO METODUYLA MANYETİK KARAKTERİZASYONU, Poster Sunumu, ADIM FİZİK GÜNLERİ IV, 28 Mayıs 2015, 28 Mayıs 2015, 190.

Gökmen ZARARSIZ, Vahap ELDEM, Selçuk KORKMAZ, Dinçer GÖKSÜLÜK, İzzet Paruğ DURU, Turgay ÜNVER, Ahmet ÖZTÜRK, DE-BRUIJN GRAFİKLERİ İLE DE NOVO GENOM DİZİLEME ANALİZLERİ, Poster Sunumu, XVI. ULUSAL BİYOİSTATİSTİK KONGRESİ, 10 Eylül 2014, 10 Eylül 2014, 68.

Gökmen Zararsız, Dinçer Göksülük, Selçuk Korkmaz, Vahap Eldem, İzzet Paruğ Duru, Turgay Ünver, Ahmet Öztürk, RNA-DİZİLEME VERİLERİ İLE GEN EKSPRESYONUNA DAYALI SINIFLANDIRMADA YENİ BİR YAKLAŞIM VE MLSEQ R/BIOCONDUCTOR YAZILIMI, Sözlü Sunum, XVI. ULUSAL BİYOİSTATİSTİK KONGRESİ, 10 Eylül 2014, 10 Eylül 2014, 39 - 40.

Dinçer GÖKSÜLÜK, Gökmen ZARARSIZ, Selçuk KORKMAZ, Vahap ELDEM, İzzet Paruğ DURU, RNA-DİZİLEME VERİLERİNDE KULLANILAN ANLAMLILIK TESTLERİNE İLİŞKİN HESAPLAMA SÜRELERİNİN KARŞILAŞTIRILMASI, Poster Sunumu, XVI. ULUSAL BİYOİSTATİSTİK KONGRESİ, 10 Eylül 2014, 10 Eylül 2014, 62.

Diğer yayınlar:

Gokmen Zararsiz, Dincer Goksuluk, Selcuk Korkmaz, Vahap Eldem, Izzet Parug Duru, **Turgay Ünver**, Ahmet Ozturk, Classification of RNA-Seq Data via Bagging Support Vector Machines. (2014) doi: <http://dx.doi.org/10.1101/007526> BioRxiv

Ödüller:

Sözlü Bildiri

Dinçer Göksülük, Selçuk Korkmaz, Vahap Eldem, İzzet Paruğ Duru, Turgay Ünver, Ahmet Öztürk, RNA-Dizileme Verileri ile Gen Ekspresyonuna Dayalı Sınıflandırmada Yeni Bir Yaklaşım ve MLSeq R/BIOCONDUCTOR Yazılımı, Gökmen Zararsız, 16. ULUSAL BİYOİSTATİSTİK KONGRESİ, 10-12 EYLÜL 2014 |Manavgat, Antalya

Erciyes Üniversitesi Geleneksel Gevher Nesibe Tıp Bayramı, Saha Araştırmaları Kategorisinde Birincilik Ödülü, “Yeni Nesil Dizileme Sistemleri için Veri Madenciliği Aracı”

Fuar/Yarışma Katılım:

TÜBİTAK 2238 Kodlu Üniversite Girişimcilik ve Yenilikçilik Yarışması, Ulusal, 21 Nisan 2014 – 23 Ocak 2014.

Kongre/Sempozyum/Çalıştay Düzenleme:

BİYOMUT 2012; 17TH BİYOMEDİKAL MÜHENDİSLİĞİ ULUSAL KONGRESİ, DÜZENLENEN ÇALIŞTAY, Ulusal, 03 Ekim 2012 - 05 Ekim 2012.

2223-D - İşbirliği ve Öncelikli Alanlarla İlgili Etkinlik Düzenleme Desteği, 11-12 Eylül 2017, GTÜ, Organizasyon Komitesi

Hakem/Yayın Kurulu:

Journal of Physics D: Applied Physics (Hakem)
IOP Nanotechnology (Hakem)
RADYOGRAFİ (Yayın Kurulu)

Projelerde Yaptığı Görevler:

ÇOK BOYUTLU KUANTUM SİSTEMLERDE KUANTUM MONTE CARLO ALGORİTMALARI KULLANILARAK DOLAŞIKLIĞIN ÖLÇÜLMESİ, Projedeki Görevi: Araştırmacı, Destek Alınan Kuruluş: Marmara Üniversitesi BAPKO C Tipi Proje (Yurt İçi) , 10 Temmuz 2013, 10 Nisan 2016.

ANTİFERROMANYETİK İYON KATKILI DNA NANOTELLERİN ELEKTRONİK VE MANYETİK ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİ, Projedeki Görevi: Araştırmacı, Destek Alınan Kuruluş: Marmara Üniversitesi BAPKO A Tipi Proje (Yurt İçi).

İdari Görevler:

Gedik Üniversitesi/MYO/Tıbbi Görüntüleme Program Başkanı

Verilen Dersler:**Gedik Üniversitesi/MYO****2012/2013 – Güz Dönemi**

Tıbbi Görüntüleme I
Matematik I
Teknolojinin Bilimsel İlkeleri

2012/2013 – Bahar Dönemi

Tıbbi Görüntüleme II
Matematik II

2013/2014 – Güz Dönemi

Tıbbi Görüntüleme I
Fizyoloji
Bilgisayar Paket Programları
Temel Sağlık

Bilgisayar Bilgileri:

C/C++, Python, LATEX, PHP, MySQL, MATLAB, HTML, CSS, JavaScript

İşletim Sistemleri: Windows, LINUX