# İÇERİK

1.	Staj Yapılan Kurum	2
2.	Giriş	3
3.	Rapor	4
4.	Sonuç	19

## Staj Yapılan Kurum:

# **ISTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ**

1773 yılında kurulmuş olup Türkiye'nin en eski ve dünyanın en eski teknik üniversitelerinden biridir. 30000'i aşkın öğrencisi, 90'dan fazla lisans programı ve 190'dan fazla lisansüstü programı vardır. Araştırma üniversitesi statüsüyle ülkedeki bilimsel araştırmalar ve teknoloji gelişme alanlarında öncülük yapmaktadır.

Öğrencisi olduğum Fizik Mühendisliği bölümü 1982 yılında kurulmuştur. %30 İngilizce içerikli olmak üzere 4 yıllık lisans programı ve yüksek lisans, doktora programlarıyla eğitim vermektedir. Fizik Mühendisliği bölümünde 53 öğretim üyesi ve 30 araştırma görevlisi ile başlıca katı hal fiziği, yoğun madde fiziği, kozmoloji, hesaplamalı fizik ve yüksek enerji fiziği konularında araştırma yapılmaktadır.

Stajımı bölümümün akademik personeli içinde yer alan Doç. Dr. Ahmet Levent Subaşı ile çevrimiçi olarak yapacağım. Staj kapsamı, 4. sınıf bitirme tasarım projesi olmak üzere bağımsız çalışma derslerinde kullanılabilecek hesaplamalı yoğun madde fiziği projeleri için bir organizasyon çalışması ve ilgili bilgisayar alt yapısı tartışılıp örnek bir git repo'da toplanması olacaktır.

# **GİRİŞ**

15 gün sürecek stajımın amacı çok parçacıklı kuantum sistemlerinde çözümlerin bulunmasına yönelik bilgisayar tabanlı metotların öğrenilmesi ve uygulamasıdır. Bu şekilde teknik beceriler elde etmek, aktif araştırma alanlarına katkıda bulunabilmek için bir hayli önemlidir. Öncelikli olarak bir proje üzerinde çalışmayı daha verimli hale getiren doğru raporlama teknikleri, versiyon kontrolü, bibliyografi hazırlama gibi konularda yardımcı programlar öğrenilecektir. Raporlama için, Word programı ve LaTeX programlama dilinden faydalanacak, versiyon kontrol için .git uzantılı dosyalar ve bunları saklayan repositotoryler'den faydalanacak ve bibliyografi oluşturma için Zotero gibi bir yardımcı uygulamadan faydalanılacaktır.

Devamında ise çoklu kuantum sistemlerinin tanımlarından başlayarak bunların nasıl çözülebileceği tartışılacak. Çözümler için öğrenilmesi planlanan programların başında Julia programlama dili ile yazılmış kütüphaneler olan QOjulia ve ITensors kütüphaneleri geliyor. Özellikle kuantum durumlarının belirtilmesi, gerekli operatörlerin tanımlanması gibi konularda ciddi kolaylık sağlamaları bekleniyor. Aynı sistemleri iki kütüphane de çözüyor olmasına karşın işleyişleri farklıdır. QQjulia, köşegenleştirme gibi yöntemlerle problemleri çözerken ITensors, MPS tarzı yöntemleri kullanmaktadır ve bu yüzden ikincinin daha büyük sistemler için veriminin yüksek olacağını tahmin etmekteyiz. Bu kütüphanelerde deneyim elde ettikten sonra öncelikle sonucu tahmin edilebilir, öğretici örnekler yapıp, bu örneklerden yola çıkarak daha karmaşık sistemlerin çözümüne bakılması planlanıyor.

#### **RAPOR**

Yapılan Uygulama:	Referans Düzenleyicisi Kurulumu ve Kullanımı	Tarih: 23/09/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Rapor, makale ve bitirme tezleri gibi bilimsel içerikli metinler birçok kaynaktan faydalanılarak hazırlanır. Bu kaynakların metnin genelde sonunda olmak üzere belirtilmesi yazarın sorumlulukları arasındadır. Çok fazla kaynak olduğunda bu işi uygun formatta yapmak zaman alıcı bir iş olduğundan, elektronik ortamda bir düzenleyiciye ihtiyaç duyulur.

Çalışmalarımızda kullanmak üzere Zotero<sup>1</sup> isimli açık kaynak referans düzenleyiciyi kullanmaya karar verdik. Program web sitesinden indirildi ve kullanımını kolaylaştırmak için Chrome tarayıcısına ilgili bir eklenti(Zotero Connector) yapıldı. Bu eklenti ile kullanılacak kaynakçaların web sitesinden direkt olarak masaüstü uygulamasına kaynakçalar eklenebiliyor. Eğer bu eklentiden yararlanılmayacaksa masaüstü uygulamasına kaynakça olarak kullanılacak dosyaların PDF formatındaki metinleri eklenebiliyor veya kaynakçanın bilgileri elle girilebiliyor. Bu dosyalar uygulamada bir koleksiyonda birleştirilebiliyor ve bu koleksiyondaki bütün kaynakçalar export seçeneği ile beraber istenen formatta dışa aktarılabiliyor. LaTeX kullanarak raporlarımızı ve çalışmalarımızı düzenleyeceğimiz için BibTeX veya Bib-LaTeX formatlarını kullanmayı uygun bulduk. Görünürde bu iki format da farksız bir şekilde .bib dosyası export ediyor ve bu yüzden BibTeX ile devam ettik.

Son olarak bir örnek koleksiyon oluşturuldu ve bu koleksiyon BibTeX formatında dışa aktarıldı. Bu örnekte: kitap, dergi yayını, arxiv linki(eğer bir dergide yayınlanmış ise, bu dergi ve yayın ayrıntıları ile beraber) ve tezler gibi bilimsel içerikli metinler kullanıldı. Özellikle tezler için uygulamada bilgileri elle girme gereksinimi duyuldu. Bunun yanı sıra koleksiyondaki referanslara pdf veya not ekleme gibi özellikler denendi. Sonuç olarak .bib dosyalarını bu şekilde oluşturmak büyük bir kolaylık yarattı. Tek olumsuzluk, online kaynaklardan kayıt oluşturma her zaman tam uygun olmadı ve bazen elle tamamlanması gerekti.

ÖĞRENCİ İmza	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ İmza

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> zotero.org

-

Yapılan Uygulama:	Versiyon Kontrol ve Git Programı	Tarih: 24/09/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Büyük ve birden çok kişinin çalıştığı projelerde veya bireysel olarak yönetilen çalışmalarda ilerleme aşamalarının takibi önemli olabilir. Burada ilerleme aşamalarından kast edilen projeye dair metinlerin veya programlama içeriklerinin olduğu dosyalardaki değişiklikler. Her bir değişiklik ile bu dosyaların yeni versiyonlarının oluşturulduğunu düşünürsek, ne zaman, kim hangi versiyonda ne değişikliği yaptı sorularının takibi proje için önemli olabilir. Bu takibi yapmanın yollarından birisi dosyaları .git formatında git repository denilen saklama alanlarında tutmaktır.

Git, komutlarla çalışan, dosyaların verimli şekilde depolandığı ve versiyon kontrolünün yapılmasına olanak veren bir uygulamadır. Bu uygulamayı öğrenmek için çeşitli web kaynaklarının yanında Pro Git <sup>2</sup>isimli kitaptan yararlandık. Versiyon kontrolünün yanı sıra önemli özelliklerinden bir tanesi de, eğer repository github, gitlab gibi bir online sunu üzerinden paylaşılırsa, projede çalışan kişilerden birisi dosyaları kaybetse bile git kaynağı üzerinden kolayca istediği versiyona erişebilir. Bu uygulamanın güvenliği ssh key dağıtımı ile sağlanıyor ve projede ekleme/değiştirme yapabilecek kişiler denetlenmiş oluyor. Dağıtılan versiyon kontrol sayesinde de çalışan her bilgisayar mevcut proje durumuna erişimle takipte bulunabiliyor.

Programın kullanımını pekiştirmek için bir örnek de yaptık. Bu örnekte bilgisayarda lokal olacak şekilde, *git init* komutu ile bir git repository hazırladık. Öncelikle bilgisayarda bir dosya yolu belirledik. Bu dosya yoluna staj ile alakalı olan dosyaları yüklemeye başladık. Staj raporunu da içeren dosyalar yüklendikten sonra bu dosyalar staging denilen ara işlem durumuna alınması ve takip edilmesi için *git add* komutu kullanıldı. Devamında dosyaların yüklendiği ilk versiyonu koruma amacıyla *git commit* komutu kullanıldı. Eğer bu dosyalarda bir değişiklik yapılırsa, bunu Git otomatik olarak anlayacak ve *git status* komutu ile bunu biz de görebileceğiz. Son olarak staj defterinde bir değişikli yaparak ve bu değişikliği yapılan versiyonu *git add* komutu ile takip edip, *git commit* komutu ile 2. versiyon olarak kaydedip örneği tamamladık.

ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> https://git-scm.com/book/en/v2

5

Yapılan Uygulama:	Metin Yazımı için LaTeX ve Taslağı	Tarih: 25/09/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Herhangi bir araştırma yapıldıktan sonra bu araştırmanın amacı, metotları, sonuçları ve etkilerini içeren metinler yazılmalıdır. Bu metinler araştırma sürecinde raporlar olarak veya araştırma bittiğinde birer makale veya tez olarak sunulabilir. Hangi formatta olduğundan bağımsız şekilde eğer elle yazılmıyorsa bir bilgisayar programı kullanmak gereklidir. Bu program da araştırmacının işine gelecek şekilde, kullanımı kolay ve geniş bir yelpazede özellikleri olanlar arasından seçilmelidir. Biz çalışmalarımızı metne dökmek için LaTeX kullanmaya karar verdik.

LaTeX tek başına bir program olmasa da masaüstü editörlerinde veya çevrimiçi editörlerde derlenip kullanılabilen bir dildir. Seçimimizi motive eden birkaç özelliğe sahip. Komutlardan oluşan dosyaları, bu dosyalar derlenene kadar az yer kaplıyor. Farklı konularda işe yarayabilecek birçok pakete sahip, örneğin TikZ paketi ile metin içerisine grafik çizimleri yapmak mümkün. Komutlarla çalışan doğası sayesinde denklemlerin veya diğer matematiksel objelerin yazılması için büyük kolaylık sağlıyor. Üzerinde çalışılan dosyaların, projede diğer bulunanlar ile paylaşılması ve bu dosyalarda beraber bir şekilde değişiklik yapılması çok kolay. Son olarak bütün paketleri ve çoğu editörü bedavaya kullanılabiliyor.

Biz, özellikle bitirme tasarım projesinin veya bu projeye kadar yapılan raporlamalarda kullanılması için bir LaTeX taslağı oluşturduk. Bu taslakta kapak sayfası, özet, teşekkürler, içindekiler bölümü, metnin yazıldığı giriş gibi bölümler ve en sonda referansların olduğu bölümler yer aldı. İşe yarayacak birçok paket eklendiği için bu bölümlerin bazıları son metinde gizlenerek rapor taslağı olarak da kullanılabilir. Ayrıca metnin içerisinde örnek olması amacıyla metin bölümlerine referans verme, figürlere referans verme, tablolara referans verme, denklemlere referans verme gibi özellikler gösterildi. Son olarak Zotero ile oluşturduğumuz örnek BibTeX formatındaki dosya taslağa eklendi ve metin içinde alıntı yapma örneği de tamamlanmış oldu.

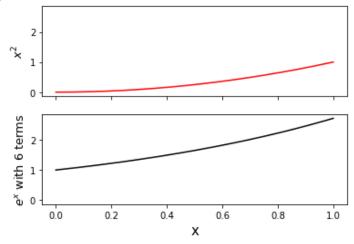
ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza

Yapılan Uygulama:	Figür Çizdirme ve Kaydetme	Tarih: 26/09/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Bilimsel çalışmaların en önemli çıktılarından birisi veridir. Bu veriler, gözlemler sonucu, deneyler sonucu veya nümerik çözümlerin sonucu olarak elde edilebilir. Bilimsel çalışmanın sunulduğu metinde bu verilerin de yer alması, çalışmanın verdiği güveni pekiştirmek için önemlidir. Fakat büyük veri setleri için tablolar çok yer kaplayacağı için daha sade bir gösterime ihtiyaç duyulur. Bunun için en iyi opsiyon verilerin bir grafik ile temsil edilmesidir.

Grafik elde etmek için kullanılabilecek birçok bilgisayar programı var. Bizim tercihimiz nümerik çözümlerin yapılır veririnin de elde edildiği program ile grafikleri de oluşturmak olacak. Burada Python veya Julia programlama dilleri arasında bir tercih yapmak söz konusu oldu. Fakat tercih yapmamıza gerek kalmadı çünkü iki dil de pyplots adlı kütüphane ile uyumluluk içerisinde figür üretebiliyor.

Örnek olarak üç farklı figür çizdirdik ve bu figürleri, .pdf, .png gibi farklı formatlarda kayıt ettik. İlki, üç farklı eğrinin x ve y eksenleri ile iki boyutlu şekilde çizilmesi ve figür üzerinde isimlendirmeler yapılması ile ilgili oldu. İkincisi(Figür 1), iki eğrinin alt alta olan ayrı bölmelerde ama yıne aynı figür içinde çizilmesi ve isimlendirilmesi ile ilgili oldu. Son olarak da bir yüzey eğrisi çizdirdik.



Figür 1: Pyplots ile elde edilen örnek figür.

ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza

Yapılan Uygulama:	Tek Parçacıklı Kuantum Sistemi ve qojulia Paketi	Tarih: 27/09/2021
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Kuantum sistemlerinin anlık durumlarını ve zamana bağlı evrimlerini incelemek için Schrödinger denklemi kullanılır. Denklemin çözümünden önce sistemin toplam enerjisini kinetik ve potansiyel terimlerle belirleyen Hamiltonian'ı yazılmalıdır. Temel örneklerde bu enerji terimleri momentum ve pozisyon operatörleri kullanılarak yazılır. Örnek olarak harmonik bir potansiyel etkisinde olan tek parçacıklı sistem için Hamiltonian:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Farklı metotlarla bu Hamiltonian ve ilgili Schrödinger denkleminin çözümü mevcuttur ama biz programlama yardımı ile bir çözüm bulma amacındayız. Bunun için Julia programlama dilinin Quantum Optics paketinden yararlanacağız. Bu paketin dökümantasyonundaki örnekten de faydalanarak, harmonik potansiyelin zamana bağlı evrimini grafik olarak çizdirmeye çalışacağız.

Quantum Optics paketinden doğru şekilde faydalanabilmek için birkaç adımın takip edilmesi gerekiyor. Öncelikle hatalar çıkmaması için çözüm uzayının ve bazlarının belirlenmesi lazım. Bizim problemimizde bu pozisyon uzayı ve buna bağlı bazlar olarak belirlendi. Devamında Hamiltonian'ın yazılabilmesi için operatörlerin tanımlanması lazım ve bunlar kolaylıkla pozisyon ve momentum cinsinden tanımlandı. Son olarak Hamiltonian'ın yazılması ve zaman evriminde kullanılmak üzere ilk durum, gaussian bir dağılım fonksiyonu olarak seçildi. Zaman evrimi sonucu oluşan durumların çizilmesi için de matplotlib tabanlı çalışan Pyplots paketi kullanıldı.

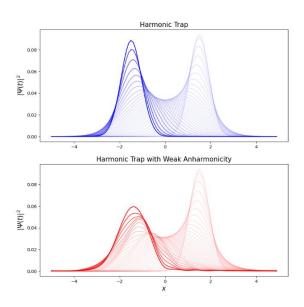
ÖĞRENCİ İmza	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ İmza

Yapılan Uygulama:	Qojulia ile Harmonik Olmayan Potansiyel Çözümü	Tarih: 28/09/2021
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Tek parçacıklı kuantum sistemleri için harmonik potansiyelde analitik çözümler mevcut. Fakat basit sarkaç örneğinde de görüldüğü gibi birçok fiziksel sistem zayıf bile olsa harmonik salınımı bozacak etkiler altında evrimleşiyor. Bunu bir kuantum sisteminde gözlemlemek için harmonik potansiyelin yanında anharmonik bir terim olması durumunda sonucun nasıl değiştiğini incelemek istedik. λ parametresine bağlı anharmonik terimin eklendiği Hamiltonian:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \lambda x^4$$

Burada basit sarkaçtan örnek alarak geri çağırıcı sinüsodial kuvvetin açılımındaki ikinci terim olarak  $x^4$  ile orantılı potansiyel terimi ekledik. Zayıf bir etki olacağı varsayımıyla  $\lambda$  değeri 0.01 olacak şekilde qojulia ile harmonik potansiyel nasıl çözüldüyse, bu problemi de o şekilde çözdük. Sonuçlar figür 2'de görülebilir. Burada klasik sistemde gözlemlendiği gibi anharmonik terim, periyodun uzamasına sebep oluyor. Bunun yanı sıra sistem durumları artık belirli bir periyotla olmayan, periyodun da zamana bağlı değiştiği bir evrim geçiriyor.



Figür 2: Harmonik ve Anharmonik potansiyelin karşılaştırılması.

ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza

Yapılan Uygulama:	Qojulia ile Spin Sistemleri Tanımlanması ve Git Repo Düzenlemesi	Tarih: 29/09/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Çok parçacıklı kuantum sistemlerinin bilgisayar tabanlı çözümlerinin yapılmasından önce bu sistemlerin temsilinin yapılacağı bazların belirlenmesi gereklidir. Burada, sistemleri önemli bir yere sahiptir ve sonlu Hilbert uzaylarında tanımlanabilirler. Bunun anlamı operatörler ve bazlar sonlu boyuttaki matrisler ve vektörler ile tanımlanabilirler. Böylece programların kullanacağı işlem gücü ve hafıza konusunda sınırlı olur. Örneğin spin ½ bazında tek parçacık için iki öz vektör baz oluşturur ve operatörler 2x2 boyutlarında olan  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  Pauli spin matrisleri ile tanımlanır. Bunu qojulia *SpinBasis* komutu ile bazları oluşturup, *sigmax*, *sigmay*, *sigmaz*, komutlarıyla da bu baza bağlı operatörleri tanımlayıp otomatik bir biçimde yapar. Bu sayede daha yüksek(1,5/2...) spin değerlerine sahip sistemler sıfırdan tanımlama yapmaya ihtiyaç duymadan hızlıca oluşturulabilir.

Bu çalışmalara ek olarak projenin daha verimli ilerlemesi için Git repositoryde bazı düzenlemelere gidildi. Öncelikle projede bulunanların rahatlıkla dosyalara erişiminin sağlanması için repository, github isimli kullanması bedava olan sunucuya eklendi. Bunu yapmak için github da yeni bir repository tanımlandı ve kaynak olacak lokal repository buraya *push* komutu ile eklendi. Bu sunucudaki dosyalar erişim izni olan ve kendi lokal dosyalarını güncellemek isteyenler de *pull* komutunu kullanarak son versiyona ulaşabiliyor. Bunun yanı sıra dosyaları düzene koymak için kodların ve latex dosyalarının ayrıldığı klasörler oluşturuldu. Kod dosyaları içerisinde karmaşayı azaltmak için programın çalıştığı ve verileri üreten kodlar ile figürleri çizdiren kodlar birbirinden ayrıldı. Projenin ilerleyişi mümkün olduğunca terminal komutlarıyla sağlanıp, pratikleştirilmesi için adımlar atıldı.

ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza

Yapılan Uygulama:	Çok Parçacıklı Kuantum Sistemlerine Giriş ve Qojulia ile Tanımlanmaları	Tarih: 30/09/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Mıknatıslanma gibi birçok doğa olayı tüm sebepleri ile makroskopik modellerle açıklanamamaktadır. Bu gibi durumlarda açıklamaların kuantum mekaniğine uyan parçacıkların çoklu bir sistem olarak davranışlarından kaynaklandığı gözlemlenmiştir. En çarpıcı örneklerinden biri ferromagnetlerdir, bu şekilde adlandırılan malzemelerde spinlerin birbirine paralel durma eğilimi gösterdiği ve bu yüzden mıknatıslanma gerçekleştiği gözlemlenmiştir. Fakat bu şekilde çoklu kuantum sistemlerini ele almanın ciddi zorlukları vardır. Bunlardan birincisi, çok fazla parçacık olmasıdır.  $10^{23}$  Gibi mertebelerde etkileşen parçacıkları için operatörler ve uzaylarını tanımlamak mümkün değildir. İkincisi ise parçacıkların etkileşimlerinin ne boyutta olduğunu ön görmek oldukça zordur. Bu zorluklar düşünüldüğünde en iyi yöntem olarak matematiksel modeller oluşturup bunlara yaklaşık çözümler bulmak olarak gözüküyor.

Kullanılacak modeller genellikle bir Hamiltonian oluşturma ile hayata geçiriliyor. Çok parçacıklı sistemlerde spin bazlarının sonlu Hilbert uzayı veya Fock bazlarının uzayı tercih edeceklerimiz arasında. Bunlar, qojulia ile sırasıyla *SpinBasis* ve *FockBais* komutları ile oluşturulan bazlar ile tanımlanmaya başlanır. Daha sonra çok parçacık temsiller için *tensor* komutu ile tensör çarpımları ( $\otimes$ ) ile bazların veya operatörlerin çok parçacıklı uzayda tanımlanması ile elde edilebilir. Örneğin iki parçacıklı bir spin ½ sistemi için ilk parçacığa etkiyen z yönündeki spin operatörünü bulmak için  $S_1^z = \sigma_z \otimes I$  işlemi yapılabilir. Burada I 2x2 boyutunda bir birim matristir. Bu şekilde operatörler ile Hamiltonian tanımlanıp qojulia'nın komutlarıyla zaman evrimine, beklenen değerlere vb. bakılabilir.

Çoklu kuantum sistemlerde modellerin inşa edilmesinde dikkat edilmesi gereken bir diğer husus da bu parçacıkların hangi dağılım istatistiğine uyduğunu belirlemektir. Üç farklı şekilde olabilir; ayırt edilebilen parçacıklar, ayırt edilemeyen fermiyonlar ve ayırt edilemeyen bozonlar olmak üzere. Burada önemli olan fermiyon ve bosonların ayırt edilemez olması ve operatörlerinin buna göre inşa edilmesi ve fermiyonların anti-simetrik, bozonların ise simetrik dalga fonksiyonlarına sahip olmasıdır.

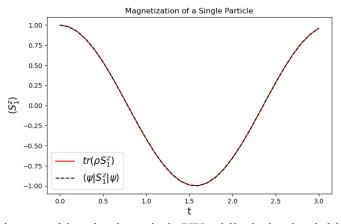
ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza
Imza		IIIIZa

Yapılan Uygulama:	QOjulia ile İki Parçacıklı Spin ½ Sisteminin İncelenmesi	Tarih: 01/10/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

İlk etapta çoklu bir kuantum sistemi incelemek için en iyi aday iki parçacıklı bir spin sistemi olacaktır. Burada baz olarak spin ½ seçildi ve qojulia'ya tanıtıldı. Bazın bir kere tanımlanması yeterli çünkü *tensor* ile oluşturacağımız operatörler iki parçacıklı davranışı tanımlamak için yeterli. Burada Hamiltonian olarak seçimimiz en basit spin etkileşimlerinden olan XX etkileşimi oldu:

$$H = \sum_{i \neq j}^{N} J_{\{ij\}} S_i^x S_j^x$$

Burada N parçacık sayısı, i ve j birbiriyle etkileşen parçacıklar için indisler ve  $S_i^x$  operatörleri indise göre etkiyen x yönündeki spin operatörleridir. Eğer J sayıları -1 ise etkileşim ferromanyetik +1 ise anti-ferromanyetik olacaktır. Bu Hamiltonian'ı hazırlayıp 1. parçacığın manyetizasyon değerinin zamana bağlı değişimine baktık. Bunun için ilk olarak qojulia'nın expect komutunu kullandık, ikinci olarak da  $tr(\rho S_1^z)$  şeklinde yoğunluk matrisi kullanarak aynı beklenen değeri bulduk. Sonuçlar Figür 3'te görülebilir.



Figür 3: İki parçacıklı spin sisteminde XX etkileşimine bağlı birinci parçacığın manyetizasyonunun zamana bağlı değişimi.

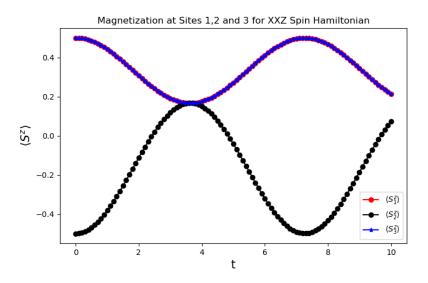
ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza

Yapılan Uygulama:	N Boylu Spin Zincirleri ve Heisenberg Modeli Uygulaması	Tarih: 02/10/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

İki parçacıklı spin etkileşimi modellendikten sonraki adım herhangi bir N sayısında spin için modellemek olacaktır. Bunun için yeni bir metoda ihtiyacımız yok. Sadece tensör çarpımlarını kullanarak daha büyük bazlar oluşturup, operatörleri buna uygun uzayda tanımlayacağız. Daha büyük uzaylarda operatörleri kolayca tanımlayabilmek için tek yeni komut olarak *embed* kullanacağız ve Hamiltonian'ı yazmak için döngüler kullanacağız. Daha genel bir spin etkileşimi Hamiltonian'ı olarak Heisenberg XXZ modelini seçtik:

$$H = \sum_{i \neq j}^{N} J_{x} \left( S_{i}^{x} S_{j}^{x} + S_{i}^{y} S_{j}^{y} \right) + J_{z} S_{i}^{z} S_{j}^{z}$$

Burada etkileşim  $S \cdot S$  olacak şekilde bütün spin bileşenlerinin iç çarpımı şeklinde tanımlanmıştır. Üç spinli ve başlangıç durumu  $|010\rangle$  olan bir zincir için edilen simülasyon sonuçları Figür 4'te görülebilir.



Figür 4: 3'lü spin zincirinde spinlerin manyetizasyonunun zamana bağlı değişimi.

İmza

Yapılan Uygulama:	Holstein-Primakoff Dönüşümleri	Tarih: 03/10/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Elimizdeki araçlarla sonlu uzaylardaki etkileşimleri simüle etmek ve yorumlamak artık mümkün. Fakat çoğu kuantum sistemi için sonlu uzaylar tanımlamak bir hayli zordur. Şimdiki amacımız spin zincirlerinin örgü noktalarında bulunan bozonik parçacıklar için bir model oluşturmak. Bunun için Holstein-Primakoff dönüşümü olarak adlandırılan bir yöntem kullanacağız. Burada amaç, bozonik yok etme-var etme operatörlerini Fock uzayında tanımlayıp spin sistemine haritalandırmaktır. Bu eşleştirme spin operatörlerinin şu şekilde tanımlanmasıyla yapılır:

$$S^{+} = \sqrt{2S - n_b} b$$

$$S^{-} = b^{\dagger} \sqrt{2S - n_b}$$

$$S^{z} = S - n_b$$

$$n_b = b^{\dagger} b$$

Burada,  $S^+$  spin yükseltme operatörü,  $S^-$  spin düşürme operatörü,  $S^z$  z yönündeki spin operatörü,  $b^+$  bozonik var etme operatörü ve b bozonik yok etme operatörüdür. Örgüdeki bozon sayısını limitleyici faktör olarak 2S tanımlanmıştır, yani örgü spin ½ cebrine uyuyorsa o örgü noktasında sadece bir bozon bulunabilir. Bu dönüşümler uygun şekilde indisler de takip edildiğinde ve XXZ Hamiltonian'ına eklendiğinde sınırlı uzayda simüle edebileceğimiz bir model oluşturulmuş olacak. Bu işlemlerin sonucunda elde edilen Hamiltonian:

$$H_{hp} = \sum_{i \neq j}^{N} J_{x} \left( S(b_{i}b_{j}^{\dagger} + b_{i}^{\dagger}b_{j}) - \frac{1}{4} (b_{i}b_{j}^{\dagger}n_{j} + n_{i} b_{i}b_{j}^{\dagger} + b_{i}^{\dagger} (n_{i} + n_{j})b_{j}) + \frac{1}{16S} \left( n_{i}b_{i}b_{j}^{\dagger}n_{j} + b_{i}^{\dagger}n_{i}n_{j}b_{j} \right) + J_{z}(S^{2} - Sn_{j} - Sn_{i} + n_{i}n_{j})$$

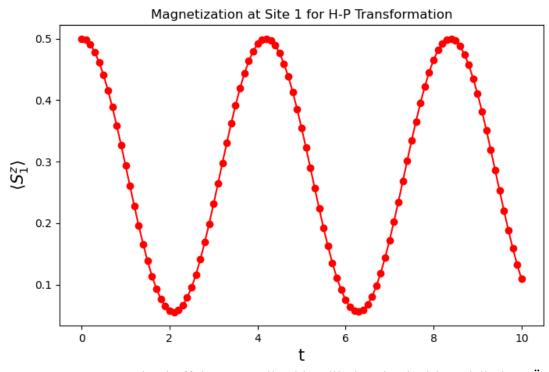
Burada sadece kuadratik terimler hesaba katılırsa spin dalgalarını temsil eden bir temsil bulabiliriz. Bu yöntemle ulaşılabilen analitik dağınım bağlantısı şu şekildedir:

$$H = \sum_{k} \epsilon_{k} b_{k}^{\dagger} b_{k}$$
$$\epsilon_{k} = qJS(1 - \gamma_{k})$$

ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza

Yapılan Uygulama:	Holstein-Primakoff Dönüşümünün 3'lü Spin Zinciri için Uygulaması	Tarih: 04/10/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Hamiltonian'ı tanımlandıktan sonra Holstein-Primakoff dönüşümünün uygulamasını yapmak qojulia ile tanımlı metotlarla kolay olacaktır. Burada ilk örnek olarak 3 spinden oluşan spin ½ cebrine uyan bir model oluşturacağız. Buna uygun olarak bozonik operatörler FockBasis(1) ile oluşturulan baz ve create, destroy komutları kullanılarak oluşturulacaktır. Dönüşüme uygun şekilde tanımlanmış ve başlangıç durumu  $|010\rangle$  olan sistem için  $S_1^z$  operatörünün beklenen değerine baktığımız simülasyonun sonuçları Figür 5'te görülebilir.

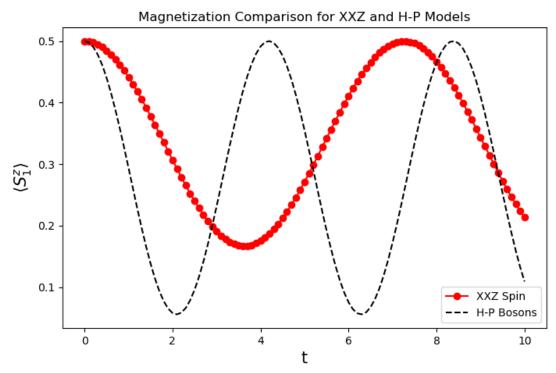


**Figür 5:** Holstein-Primakoff dönüşümü ile elde edilmiş spin zinciri modelinde 1. Örgü noktasında beklenen manyetizasyonun zamana bağlı değişimi.

ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza

Yapılan Uygulama:	XXZ Modeli ile Holstein-Primakoff Modelinin Karşılaştırılması	Tarih: 05/10/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Şimdiye kadar yaptığımız iki uygulamayı karşılaştırmak istiyoruz. Hem XXZ Heisenberg etkileşimine bağlı spin zinciri hem de Holstein-Primakoff dönüşümü ile elde edilen bozonik yapıda aynı parametreleri kontrol ettik. Bu ikisinin karşılaştırıldığı grafik, Figür 6'da görülebilir. Burada ilk gözlem iki etkileşim de benzer davranış gösterdiği fakat dönüşüm ile elde edilen model 0 noktasına inerken spin zincirinin inmemesi olacaktır. Buna sebep olarak dönüşümde dahil edilmeyen terimlerin etkisini gösterebiliriz. Ayrıca bozonik yapının daha yüksek bir frekans ile periyodik bir manyetizasyon gösterdiğini fark ediyoruz.



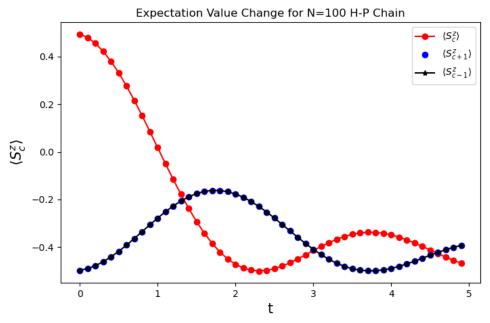
**Figür 6:** Holstein-Primakof dönüşümü ve XXZ spin zinciri ile oluşturulan modellerin manyetizasyon açısından karşılaştırılması.

ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
÷		İmaza
Imza		Imza

Yapılan Uygulama:	ITensors Kütüphanesi	Tarih: 06/10/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		
ile 2 <sup>N</sup> * 2 <sup>N</sup> şeklinde bü hafızasının yetersizliğin operatörleri yazmak ye yapılabilir. Burada, örg çarpımları Trotter deko kapılar, kuantum durun edilen zaman evrimi op network algoritmaları s	ock uzayında çalıştığımızda oluşan operatörler keyümektedir. Bu da N çok büyüdüğünde direkt çönden dolayı çok zorlaştığı anlamına gelir. Alternarine matrix product state(MPS) olarak adlandırıla gülerin bağlantılarına göre tensör çarpımları tanın ampozisyonu adı verilen bir yaklaşık metotla kapınına etkiyen operatörler olarak tanımlanabilir. Teratorunun MPS durumuna etkin bir şekilde uygayesinde mümkün olmaktadır.	özümlerin bilgisayarın atif olarak, bu devasa an yöntem ile çözümler alanır ve bu tensör alara çevrilir. Burada rotter sonucunda elde ulanması tensör
julia programlama dili spin durumları, qubit d sistemi temeli tanımlı. dolayısıyla tensör çarpı qojulia metotları veya d	n teker teker tanımlanmasına ihtiyacımız yok çün ile yazılmış olan ITensors kütüphanesini kullanadırımları, boson durumları gibi birçok işimize yazılmı boson durumları gibi birçok işimize yazılmı temellerin yanı sıra op gibi komutlarla rahatlı mlarını tanımlayabiliyoruz. Umudumuz, bu kütülaha alt seviye metotlarla simüle edemediğimiz 1 stemleri inceleyebilmek.	cağız. Bu kütüphanede rayabilecek kuantum kla operatörleri ve phanenin yardımı ile
ÖĞRENCİ İmza	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ İmza

Yapılan Uygulama:	ITensors ile Holstein-Primakoff Dönüşümü Uygulaması	Tarih: 07/10/2021.
Uygulamanın Yapılacağı Birim:		

Daha önce qojulia ile 3 örgü noktalı bir spin ½ zincirine Holstein-Primakoff(H-P) dönüşümü yaptığımız bir uygulamanın benzerini ITensors ile yapacağız. Fakat bu sefer çözüm için MPS kullanacağız ve örgü uzunluğu 100 olarak belirlenecek. Daha önce H-P dönüşümü ile elde ettiğimiz Hamiltonian'ın sadece ilk terimini kullanacağız çünkü kalanlar Trotter dekompozisyonuna uygun değiller. İlk uygulamada sadece merkezde bulunan örgü noktası için bozon operatörü olarak manyetizasyonu(Figür 7) inceledik, burada ilk durum olarak merkezdeki noktada 1 ve kalan noktalarda 0 olacak bir ket seçildi. Çalışmaların devamında bu gibi büyük sistemlerde spin dalgası özelliklerini incelemek de faydalı bir uygulama olacaktır.



**Figür 7:** 100 örgülü bir sistemde H-P dönüşümü ile elde edilmiş Hamiltonian'a bağlı merkez örgü noktasındaki manyetizasyonun beklenen değerinin zamana bağlı değişimi.

ÖĞRENCİ	ONAY	FİRMA YETKİLİSİ
İmza		İmza

## **SONUÇ**

Stajın ilk haftası raporlama için taslak oluşturma, bibliyografya düzenleme için Zotero isimli programın öğrenilmesi ve versiyon kontrolünün yapılması için .git dosyalama siteminin ve komutlarının öğrenilmesi ile geçti. Bunlar sonucunda çok daha pratik, düzenli ve titiz ilerleyen bir proje yönetimi geliştirildi.

Devamındaki iki haftada ise çok parçacıklı kuantum sistemlerinin tanımları ve çözümlerini içeren metotlar öğrenildi. Özellikle Julia programlama dili ile yazılmış QOjulia ve ITensors kütüphanelerinden yararlanıldı. Bu kütüphanelerin öğrenilmesi sayesinde spin-spin etkileşimleri veya spin örgülerinde tanımlanmış bozonların davranışını inceleyen sistemler için örnek çözümler sunuldu. Bu tür sistemler öncü fizik araştırmalarında çokça karşımıza çıktığı için staj sonrası yapılacak çalışmalarda öğrenilenlerin ciddi bir faydası olduğu yönünde sonuca vardık. Yaptığımız çalışmaları ve kullanılan kaynakları herkesin takip edebilmesi için bir github³ repository'de erişime açtık.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> https://github.com/AtalayEge/Atalay\_Staj