

## NMR KUANTUM BİLGİSAYARLARI

İrfan Şaka\*, Ahmet Gün ve Azmi Gençten

*Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen--Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 55139-Kurupelit, Samsun, Türkiye.* E-mail: [isaka@omu.edu.tr](mailto:isaka@omu.edu.tr)

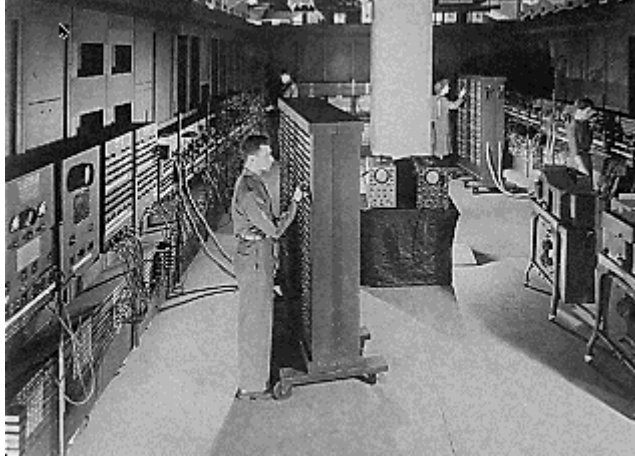
**Anahtar Kelimeler:** NMR, Kuantum Bilgisayarları, Kubit, Kuantum Mantık Kapıları.

Klasik bilgisayar teknolojisindeki hızlı gelişim, 15-20 yıl gibi yakın gelecekte devre elemanlarının atomik boyuta indirgeneceği dolayısıyla kuantum mekaniği koşullarının hüküm sürdüğü bir dünyaya merhaba denileceğine işaret etmektedir. Bu şartlar altında oluşturulacak bilgisayara da kuantum bilgisayarları denilmektedir. Bilgi saklama işlevini kubitlerin (kuantum bit) üstlendiği bu bilgisayarlar sayesinde klasik bilgisayarların yıllarca süren hesaplamalarını birkaç saniye gibi çok kısa bir sürede yapılabilecektir. Teknolojik yarışın kıyasıya sürdüğü son yıllarda gerek yatırımcılar gerekse araştırmacılar kuantum bilgisayarları konusuna fazlasıyla önem vermektedir. Fiziğin birçok alt dalında da bu konunun teorisini oluşturulmaya yönelik büyük sermayeli Araştırma-Geliştirme (Ar-Ge) projeleri yürütülmektedir. Teorisinin pratiğinden bir hayli ilerde gittiği bu alt dallar arasında NMR (Nükleer Manyetik Rezonans) spektroskopisi bilgi işleme konusunda önemli ilerlemeler kaydetmiştir. Bu çalışmada kuantum bilgisayarları, NMR spektroskopisi ve NMR kuantum bilgisayarları konuları ele alınacaktır.

## TARİHÇE

İnsanoğlu, muhteşem bir beyin gücüne sahip olmasına rağmen zaman içerisinde hesaplamaları kolaylaştırmak için bazı araçlara ihtiyaç duymuştur. 1600’lü yıllarda Blaise Pascal dişli çarklarla çalışan toplama–çıkarma yapabilen bir hesap makinesi geliştirmiş ve yine bu yıllarda Gottfried Wilhelm Leibniz bunu geliştirerek ikili sayı sistemini bulunmasıyla bilgisayarların gelişmesine önemli katkıda bulunmuştur. 1800’lü yıllarda Joshep-Marie Jacquard delikli kartlarla kontrol edilen otomatik dokuma tezgâhı geliştirmesi bilgi işlemesine yeni bir boyut kazandırmıştır. 1930 yılında fizikçi John V. Atanasoff basit bir radyo lambası (vakum tüpü) geliştirmesiyle bilgisayar yapımında lambaların kullanılmasına başlanılmıştır. 1938 yılında Alman mühendis Konrad Zuse ikili sisteme göre çalışan Z1 adında ilk dijital bilgisayarı yapmıştır. Elektronik olarak çalışan ilk bilgisayar 1946 yılında yapılmıştır. “ENIAC” isimli bu araç 18 bin lamba ve çok sayıda elemanlar kullanılarak 130 m<sup>2</sup>’lik bir alana yapılmış, 30 ton ağırlığında ve saniyede 5000 işlem yapabilmektedir (bkz Şekil 1).

## ŞAKA, GÜN, GENÇTEN



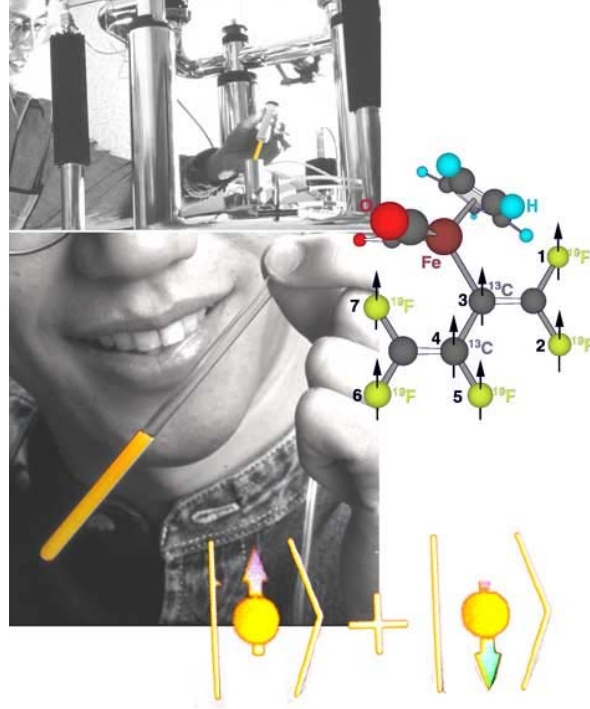
Şekil 1. İlk bilgisayar ENIAC

“Klasik bilgisayar” olarak isimlendirilen bu bilgisayarlar kullanılmaya başlandıktan sonra çok hızlı bir gelişim sürecine girmiştir. Bilgisayarlarda elektronik devre elemanları olarak tel, direnç, kapasitör gibi lineer; diyot, transistor gibi lineer olmayan öğeler kullanılmaya başlandıktan sonra kısa sürelerle hızları ikiye katlanmış ve günümüzde cebimize girecek kadar küçülmüştür.

Kuantum bilgisayarı fikri 1980’lerin ilk yıllarında Benioff ve Feynman tarafından ortaya atılmıştır [1]. 1985’te Davit Deutsch evrensel kuantum bilgisayarlarını tanımlayan bir makale yayınlamıştır [2]. 1989’da Deutsch evrensel üç bit kuantum mantık kapılarını teorik olarak ortaya koyup, kuantum durumlarının çakışması (dolanıklılık) özelliği sayesinde kuantum bilgisayarının klasik bilgisayardan çok daha güçlü olabileceğini göstermiştir [3].

1994’te Peter Shor, kubit’lerin dolanıklılık özelliğini kullanarak bir tam sayının asal çarpanlarını bulmak için bir algoritma geliştirmiştir[4].

Isaac Chuang ve çalışma ark. Peter Shor’un algoritmasını kullanarak ilk 2–kubitlik kuantum bilgisayarı 1998 yılında Berkeley üniversitesinde oluşturdular. Çalışmalarını IBM’de sürdüren Chuang ve Ark. 2001 yılında 15 sayısının asal çarpanlarını bulmak için Şekil 2’de gösterilen 7–kubitlik bir molekül oluşturdular [5].



Şekil 2. 7-kubitlik bir kuantum bilgisayarına bakan araştırmacı [6]

Günümüze kadar kuantum bilgisayarlarıyla ilgili birçok çalışma yapılmıştır. Fakat uygulaması olarak bilinen son bilgi 7-kubitlik bir moleküldür [7].

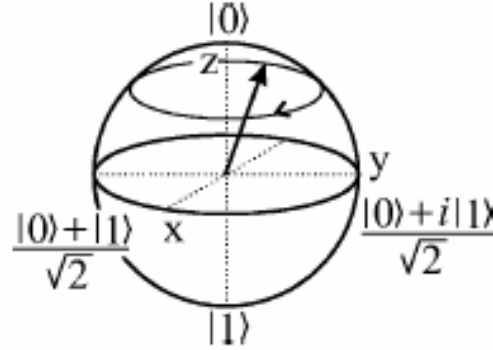
## NİÇİN KUANTUM BİLGİSAYARI?

Günümüzde modern fizik, bilgisayar ve madde biliminin kesiştiği noktada iki temel eğilim söz konusudur. İlki bir bilgisayar çipine daha fazla aygıt sıkıştırmaya çalışan klasik yaklaşım (nanoteknoloji) diğeri atomik parçacıklardan oluşan bir sistem için kuantum mekaniksel yaklaşımdır.

Klasik bilgisayarların hızını test etmek için 1600 bilgisayarı bir ağ ile birbirine bağlayarak 129 haneli bir sayıyı çarpanlarına ayırmaya çalışılmış ve bu işlem 8 ay gibi bir sürede tamamlanmıştır. 250 haneli bir sayıyı için ise bu işlemin asırlar süreceği aşikârdır. Bunun yanı sıra bazı fiziksel problemlerin çözümünde klasik bilgisayarların çaresiz kaldığı görülmektedir. Bu türden problemlerin aşılabilmesi için araştırmacılar farklı arayışlara girmiştir. Sonuçta imkânsız olarak nitelendirilen işlemleri yapabilecek bir bilgisayar yapılabileceği 1980'lerin ilk yıllarında Benioff ve Feynman tarafından bir fikir olarak ortaya atılmış ve bu bilgisayarlara "kuantum bilgisayarı" denmiştir. Atomik boyuttan oluşan bu türden bir dünyayı tanımlamak ancak kuantum fiziği kanunlarıyla mümkündür. Dolayısıyla bilgi saklama işlemini kuantum bit (kubit) denilen atom, elektron, çekirdek, foton gibi

## ŞAKA, GÜN, GENÇTEN

kuantum fiziği kanunlarına tabii olan parçacıklarla sağlanması öngörülmektedir. Şekil 3’de bir hidrojen çekirdeğinin taban durumda,  $|0\rangle$ , uyarılmış durumda,  $|1\rangle$  yada dolanık denilen,  $C_1|0\rangle+C_2|1\rangle$ , sonsuz farklı durumda da bulunabilmektedir.



Şekil 3. Spini 1/2 olan bir çekirdeğin bir manyetik alan içindeki hareketi

Kuantum bilgisayarlarını klasik bilgisayarlardan ayıran en önemli ve tek üstünlük “kuantum paralelizm” denilen dolanıklılık durumudur.

Niçin kuantum bilgisayarı sorusuna;

- Haberleşme alanında mükemmel şifreleme ve şifre çözme özelliğine sahip olduğunun düşünülmesi (Kriptoloji)
- Mükemmel algoritmik tarama yapabilmesi (Grover algoritması)
- Büyük sayıların çok hızlı çarpanlara ayrılması (Shor algoritması)
- Kuantum mekaniksel sistemlerin tasvir edilmesi

gibi üstün özelliklere sahip olacağı düşünülmektedir.



Şekil 4: Bit ve Kübit [8].

Kuantum bilgisayarlarının teorisini ve prototipini oluşturmaya yönelik fiziğin birçok alt dalında çalışmalar hızla devam etmektedir. Bunlardan bazıları; katı-sıvı EPR ve NMR, süperiletken Joshepson eklemleri, spin polarizasyonu, iyon yakalama spektroskopisi, ferroelektriksel olarak çiftlenen kuantum dotları v.s.. Bu alt dallar arasında sıvı NMR gerek teorik gerek deneysel olarak diğerlerinden bir hayli öndedir.

### NMR KUANTUM BİLGİSAYARLARI

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) spektroskopisi, Kuantum bilgisayarlarının oluşturulmasına yönelik çalışmalara son derece yararlı olmuştur. Son zamanlarda küçük moleküllerin NMR'ına dayanılarak bilgisayar oluşturmadaki çabalarında büyük başarılar görülmektedir [9-14].

Bir kuantum bilgisayarı oluşturmak için N tane birbiriyle etkileşen çekirdeğin bir arada olması ve bu çekirdeklere hem bilgi saklaması hem de bilgi işlemesi işlemi yaptırılması gereklidir. Bu işlem ise sadece Radyodalga (rf) pulsı kullanılarak gerçekleştirilebilir. Dolayısıyla NMR spektroskopisi kullanmak gereklidir. Bu çalışmada NMR'ın spesifik bir alanı olan Çarpım İşlemci Teorisi kuantum mantık kapılarını açıklamada kullanılacaktır.

Çok-pulsu zayıf çiftlenimli sıvı NMR deneylerinin sonucunu yoğunluk matrisi kuramı kullanılarak analitik olarak belirlemek mümkündür. Yoğunluk matrisi  $\rho$  ile gösterilmektedir.  $\psi$  gibi bir dalga fonksiyonu için yoğunluk matrisi;

$$\rho = \psi\psi^* \text{ veya } \rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

Termal dengedeki tek spinli bir sistem için yoğunluk matrisi;

$$\rho_{denge} = \frac{1}{2} \hat{E} + \frac{\hbar\gamma_I B_0}{2kT} \hat{I}_z$$

ifadesi ile hesaplanılır. İkinci terimde  $I_z$  spin açısız momentum işlemcisi olduğundan sadece bu terime puls uygulanarak zaman içindeki gelişimi takip edilerek beklenen sinyal analitik olarak hesaplanır.

Yoğunluk matrisi çarpım işlemcilerden oluştuğundan dolayı, NMR'da işlemcilerin ve işlemcilerin birbiriyle olan ilişkisinin önemi bir hayli büyüktür. Açısız momentum işlemcileri kullanılarak çok-pulsu NMR deneylerinin incelenmesine Çarpım İşlemci Kuramı denilmiştir.

Zamana bağlı yoğunluk matrisi için Hareket Denklemi

$$\frac{d\hat{\sigma}}{dt} = -i[\hat{H}, \hat{\sigma}]$$

dir. Bu denklemin genel çözümü;

## ŞAKA, GÜN, GENÇTEN

$$\sigma(t) = \exp(-iHt)\sigma(0)\exp(iHt)$$

dir [15]. Burada  $s(0)$  başlangıç yoğunluk matrisi,  $H$  toplam hamiltoniyendir.  $H$  zayıf bağlaşımlı spin sistemlerinde çok pulslu NMR deneylerinde geçerli kimyasal kayma,  $rf$  pulsu ve spin-spin çiftlenim Hamiltoniyenlerinden ibarettir. Puls süresince çarpım işlemcileri kullanarak bu Hamiltoniyenlerin etkileri analitik olarak bulunabilmektedir.

Şimdi yukarıda kısaca anlatılan Çarpım İşlemci Teorisinin NMR Kuantum Bilgisayarları alanında nasıl kullanıldığını açıklamak gerekir. Kubitlerin yani çekirdeklerin kontrol edilebilmesi ancak  $rf$  puls programlarıyla mümkündür. Bilindiği üzere puls dizilerinin çekirdeklerden oluşan bir sisteme yapmış oldukları etkiler Çarpım İşlemci Teorisi yardımıyla teorik olarak hesaplanmaktadır.

Klasik bilgisayarlarda bitlerin değişimi/dönüşümü NOT, VE, VEYA, VEDEĞİL v.b. mantık kapıları yardımıyla gerçekleştirilmektedir. Benzer olarak kubitler yani bir çekirdeğin hem işlemci hem de bilgi saklama amaçlı kullanabileceği düşüncesi ise kuantum mantık kapıları fikrini ortaya çıkarmıştır. Kuantum mekaniği koşullarında oluşturulacak bir kuantum mantık kapısı mutlaka tersinir olmalı ve klasik mantık kapılarından farklı olarak dolanıklılık duruma dönüşümleri tasvir edebilmelidir.

### **Kuantum Mantık Kapıları:**

- NOT Kapısı

En basit Tek-kubit kapısı klasik bilgisayarlardan iyi bilinen NOT(N) kapısıdır [16].

$$|0\rangle \xrightarrow{N} |1\rangle$$

$$|1\rangle \xrightarrow{N} |0\rangle$$

Bu kapının yapmış olduğu işlemi  $180^\circ I_x$   $rf$  pulsu ile de yapılmaktadır. Bunu yoğunluk matrisini kullanarak da belirtebiliriz. Bir puls altında yoğunluk matrisinin gelişimi;

$$\sigma(t) = \exp(-i\pi I_x)\sigma(0)\exp(i\pi I_x)$$

Taban durumda,  $|0\rangle$ , yoğunluk matrisi  $\sigma(0) \propto I_z$  dir.  $180^\circ I_x$   $rf$  pulsu uygulandıktan sonra yukarıdaki ifadeden  $\sigma(t) \propto -I_z$  yani  $|1\rangle$  durumu elde edilir. Bu basit örnekten anlaşılacağı üzere eğer kuantum mantık kapısı puls ya da puls dizisi ile temsil edilebilirse mantık kapılarının yaptığı işlemler Çarpım İşlemci Teorisi kullanılarak da elde edilebilir.

## ŞAKA, GÜN, GENÇTEN

- NOT'ın Karekökü

Klasik eşitliği olmayan ve yaygın olarak kullanılan kuantum kapılarından biri de NOT 'un kareköküdür.

$$V^2 = V \cdot V = N$$

$$|0\rangle \xrightarrow{V} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle)$$

$90^\circ I_x$  pulsusu uygulamak suretiyle de aynı işlem elde edilir.

- Hadamard Kapısı

Tek-kubitin  $|0\rangle$  ve  $|1\rangle$  durumlarını dolanık hale dönüştürmek için Hadamard kuantum mantık kapısı kullanılmaktadır.

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

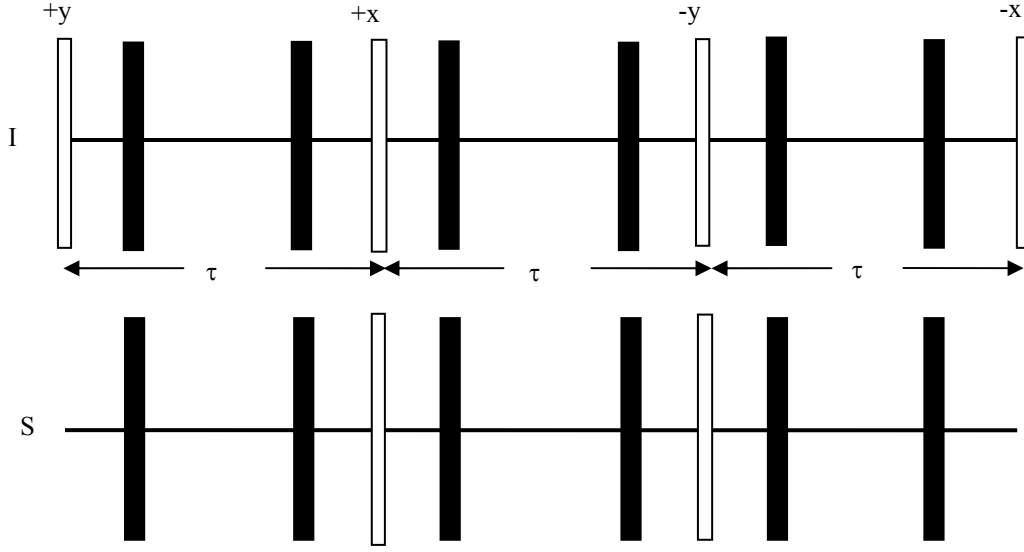
$$|1\rangle \xrightarrow{H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

$45 I_y - 180 I_x - 45 I_y$  kullanılarak aynı işlem gerçekleştirilebilir [9].

- Control NOT Kapısı (iki kubitlik)
- SWAP Kapısı
- Control-Control NOT Kapısı (üç kubitlik)
- Fredkin Kapısı
- Tofilli Kapısı

**SWAP Mantık Kapısı;**

SWAP mantık kapısı spin durumlarının değiş tokuşu esasına dayanmaktadır.



**Şekil 5.** Zayıf çiftlenimli IS spin sistemi için SWAP puls dizisi. Kapalı dikdörtgenler p , açıklar ise p/2 pulsalarını temsil etmektedir. t aralığı  $(2J_{IS})^{-1}$  , p pulsarı t/4 ve 3t/4 de uygulanır ve aynı faza sahiptir.  $I_z$  ve  $S_z$  faz kaymaları gerçekte oluşturulmadığından alıcı fazı  $3\pi/2$  dir.

Zayıf çiftlenimli iki kubitlik IS ( $I=1/2$  ,  $S=1/2$  ) spin sisteminde  $I_x$  çarpım işlemcisine SWAP puls dizisinin etkisi Çarpım İşlemci Teorisini kullanarak aşağıdaki sonuç elde edilir [17].

$$\begin{aligned}
 I_x &\xrightarrow{\pi/2I_y} I_z \xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau} I_z \xrightarrow{\pi/2I_x} I_y \xrightarrow{\pi/2S_x} I_y \\
 &\xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau} 2I_x S_z \xrightarrow{-\pi/2S_y} -2I_x S_x \xrightarrow{-\pi/2I_y} -2I_z S_x \\
 &\xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau} -2I_z S_z \xrightarrow{-\pi/2I_x} -2I_z S_x \xrightarrow{\Omega t=3\pi/2} S_x
 \end{aligned}$$

Daha ileri bir adım olarak zayıf çiftlenimli dört kubitlik IS ( $I=3/2$  ,  $S=3/2$  ) spin sisteminde  $I_x$  çarpım işlemcisine SWAP puls dizisinin etkisi Çarpım İşlemci Teorisini kullanarak aşağıdaki sonuç elde edilir.

$$\begin{aligned}
 I_x &\xrightarrow{\pi/2I_y} I_z \xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau} I_z \xrightarrow{\pi/2I_x} I_y \xrightarrow{\pi/2S_x} I_y \\
 &\xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau (\tau=1/2J)} -(2/3)I_x S_z E_S(\pm 3/2) + 2I_x S_z E_S(\pm 1/2) \\
 &\xrightarrow{-\pi/2S_y} -(2/3)I_x S_x E_S(\pm 3/2) + 2I_x S_x E_S(\pm 1/2) \\
 &\xrightarrow{-\pi/2I_y} (2/3)I_z S_x E_S(\pm 3/2) - 2I_z S_x E_S(\pm 1/2) \\
 &\xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau (\tau=1/2J)} S_y E_S(\pm 3/2) + S_y E_S(\pm 1/2) \equiv S_y \\
 &\xrightarrow{-\pi/2I_x} S_y \xrightarrow{\Omega t=3\pi/2} S_x
 \end{aligned}$$

Benzer işlemler diğer çarpım işlemciler için de yapılabilir.



## SONUÇ ve TARTIŞMA

Kuantum bilgisayarları klasik bilgisayarlara göre çok küçük çok hızlı işlem yapabilme yeteneği sahip ve çok geniş kullanım alanına sahip olabilecektir. NMR'ın kuantum bilgisayar biliminde kullanılması, bu bilime çok daha farklı bir boyut kazandırmıştır. NMR'da kullanılan birçok puls dizisi kuantum bilgisayarlarında mantık kapısı olarak kullanılmaya başlanmıştır. Gelecekte NMR'daki farklı puls dizilerinden faydalanılarak farklı mantık kapıları oluşturulabilir. Bu çalışmada oluşturulan kuantum mantık kapılarının kubitlere etkisi Çarpım İşlemci Teorisi kullanılarak incelenildiği gösterilmiştir.

Kuantum bilgisayarları ile ilgili olarak Peter Shor şöyle demiştir. "If computers that you build are quantum, Then spies of all factions will want 'em. Our codes will all fail, And they'll read our email, Till we've crypto that's quantum, and daunt 'em." Kim bilir belki de çoktan yapılmıştır!?

## KAYNAKLAR

- [1] R. P. Feynman Int. J. Theo. Phys., 21, (1982), 467
- [2] D. Deutsch, Proc. R. Soc. Lond. A 400, (1985),97-117.
- [3] <http://ffden-2.phys.uaf.edu/211.web.stuff//Almeida/history.html>
- [4] P.W. Shor, Proceedings of the 35th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science, Santa Fe, NM, Nov. 20-22, IEEE Computer Society Press, (1994), 124
- [5] [http://domino.research.ibm.com/comm/pr.nsf/pages/news.20011219\\_quantum.html](http://domino.research.ibm.com/comm/pr.nsf/pages/news.20011219_quantum.html)
- [6] [http://www.straddle3.net/context/02/i\\_0201/020103\\_7-qubit\\_quantum\\_computer.jpg](http://www.straddle3.net/context/02/i_0201/020103_7-qubit_quantum_computer.jpg)
- [7] C. Ramanathan, N. Boulant, Z. Chen, D. G. Cory, I. Chuang and M. Steffen, Quan. Info. Proc., 3, (2004), 15-44.
- [8] [www.qubit.org](http://www.qubit.org)
- [9] J. A. Jones, Prog. NMR Spec., 28, (2001), 325
- [10] M. Mehring, Appl. Magn. Reson., 17, (1999), 141
- [11] J. A. Jones, Phys. Chem. Comm., 11, (2001), 1
- [12] L. M. K. Vandersypen, C. S. Yannoni, and I. L. Chuang, Ency. Nuc. Magn. Reson., 9, (2002), 687.
- [13] T. F. Havel, D. G. Cory, S. Lloyd, N. Boulant, E. M. Fortunato, M. A. Provia, G. Teklemoriam, Y. S. Weinstein, A. Bhattocharyo and J. Hou, Q. Am. J. Physics, 3, (2002), 70.
- [14] L. M. K. Vandersypen, C. S. Yannoni, and I. L. Chuang, 2002, 9, pp 687-697 in Encylopedia of Nuclear Magnetic Resonance Volume 9: Advances in NMR (ISBN 0471 49082 2) Edited by David M. Grant and Robin K. Harris.
- [15] N. Chandrakumar , S. Subramanian : Mod. Tech. High Resol. FT NMR. New York. Siproinger (1987)
- [16] D. Mozyrsky, V. Privmon and S. P. Hotaling, Int. J Mod. Phys. B, 11, (1997), 2207.
- [17] N. Linden, H. Barjat, E. Kupce, R. Freeman, Chem. Phys. Lett., 307, (1999),198.