

FİZİK ALANINDAKİ ARAŞTIRMALARDA GÜNCEL METODOLOJİK YAKLAŞIMLAR

EDİTÖR
PROF. DR. HAKAN ÖZTÜRK

Fizik Alanındaki Arařtırmalarda Güncel Metodolojik Yaklaşımlar

Editör

Prof. Dr. Hakan Öztürk

İmtiyaz Sahibi
Platanus Publishing®

Editör
Prof. Dr. Hakan Öztürk

Kapak & Mizanpaj & Sosyal Medya
Platanus Yayın Grubu

Birinci Basım
Mart, 2026

Yayımcı Sertifika No
45813

ISBN
978-625-8513-73-8

©copyright
Bu kitabın yayım hakkı Platanus Publishing'e aittir. Kaynak gösterilmeden alıntı yapılamaz, izin alınmadan hiçbir yolla çoğaltılamaz.

Adres: Natoyolu Cad. Fahri Korutürk Mah. 157/B, 06480, Mamak,
Ankara, Türkiye.

Telefon: +90 312 390 1 118
web: www.platanuspublishing.com
e-mail: platanuskita@gmail.com



Platanus Publishing®

İÇİNDEKİLER

BÖLÜM 1	5
SrRuO₃ ve Sr₂RuO₄'ün Kristal Yapı, Manyetik Davranış ve Nötron Saçılımı Bulguları	
Özhan Ünverdi & Klaus-Ulrich Neuman	
BÖLÜM 2	27
Kuantum Dolanıklık ve Uzay-Zaman	
Emine Canan Günay Demirel	
BÖLÜM 3	39
Bose-Hubbard Modelinde Geliştirilmiş Gradyan Hesabı: Kısıtlı Boltzmann Makineleri İçin Yeni Bir Yaklaşım	
Ülfet Atav & Çağrı Kemal Erdal & Ali Tambuğa	
BÖLÜM 4	55
First-Principles Modeling of Defect-Based Solid-State Qubits in Wide Band Gap Materials	
Aslı Öztürk Kiraz	



BÖLÜM 1

SrRuO₃ ve Sr₂RuO₄'ün Kristal Yapı, Manyetik Davranış ve Nötron Saçılımı Bulguları

Özhan Ünverdi¹ & Klaus-Ulrich Neumann²

1. Giriş ve Genel Bakış

Geçiş metali oksitleri, modern katıhâl fizikinde çok yönlü kuantum fazları barındırmaları nedeniyle yoğun ilgi gören bir malzeme sınıfını temsil eder (Bednorz, J. G., & Müller, K. A. Z. 1986, Jung, C. U. J , 2023). Bu bileşikler, metal-yalıtkan geçişi, yüksek sıcaklık süperiletkenliği, dev manyetorezistans, ferroelektrik ve ferromanyetizma gibi birbirinden farklı elektronik ve manyetik özellikleri tek bir kristal yapı içerisinde sergileyebilmektedir (Kiyama, T., Yoshimura, K and Kosuge, K., 1996). Özellikle perovskit ve türevi yapılar, kristal simetrisi ile elektron korelasyonları ve spin düzenlenmeleri arasındaki güçlü etkileşim nedeniyle temel araştırmalarda sıkça incelenmektedir.

Bu bağlamda, rutenyum (Ru) içeren geçiş metali oksitleri yani ruthenatlar, 4d geçiş metalleri olması nedeniyle 3d sistemlerine kıyasla daha geniş bant yapısına, ancak benzer ölçekte elektron korelasyonlarına sahiptir. Bu durum, ruthenatları lokalize–itinerant rejim arasında konumlandırarak hem temel bilimsel sorular hem de potansiyel uygulamalar açısından dikkat çekici hâle getirmektedir.

Çalışmanın merkezinde yer alan SrRuO₃ ve Ruddlesden–Popper serisinin Sr_{x+1}Ru_xO_{3x+1} olan genel formülünü takip eden Sr₂RuO₄, stronsiyum ve rutenyum içermelerine rağmen, kristal yapıları ve fiziksel davranışları büyük ölçüde farklılık göstermektedir. (Longo, M, KJ., Raccah, P., M., Goodenough, J., B., 1968, Shikano, M., 1994).

SrRuO₃, üç boyutlu distorsiyonlu perovskit yapısına sahip bir ferromanyetik metaldir ve 165 K civarında Curie sıcaklığı sergiler. Ferromanyetik düzen, GdFeO₃ tipi yapısal distorsiyonlar ve daralmış t_{2g} bantlarının Stoner kriterini sağlaması ile ilişkilidir (Shikano, M., 1994, Randal, J. J., Roland, W., 1959, Pooja, K, Saha, B., Choudhary, N., Maji, P., K., Bera, A., K., Yusuf, S., M., Sow,

¹ Dr. Öğr. Üyesi, Elektrik – Elektronik Mühendisliği Bölümü, Yaşar Üniversitesi
ORCID: 0000-0001-9994-3487

² Prof. Dr., Bilgisayar Bilimleri Bölümü, University of Applied Science Heidelberg
ORCID: 0009-0001-8470-7059

C., 2024). Sr_2RuO_4 ise, K_2NiF_4 tipi katmanlı yapıya ve yüksek kristal simetriye sahip bir bileşiktir. 0.93 K sıcaklığında spin-triplet süperiletkenlik gösteren bu sistem, kuprat olmayan ilk tabakalı perovskit süperiletken olarak literatüre geçmiştir. Düşük boyutlu Fermi yüzeyi ve spin-fluctuation temelli eşleşme mekanizması ile öne çıkar (A Pustogow, A., Luo, Y., Chronister, A., Su, Y., S., Sokolov, D., A., Jerzembeck, F., Mackenzie, A., P., C W Hicks, Kikugaw, N., Raghu, S., Bauer, E., D., Brown, S., E., 2019, Oguchi, 1995, Walz, L., & Lichtenberg, F., 1993)

Bu iki uç bileşiğin ortak noktası, Ru^{4+} iyonlarının $4d^4$ konfigürasyonudur; ancak kristal yapılarındaki farklar, bu iyonların bağ geometrileri, spin etkileşimleri ve faz davranışlarını radikal biçimde farklılaştırmaktadır. Koordinasyon geometrisi, RuO_6 oktaedrerinin dizilimi, bağ uzunlukları, bağ açıları ve tabakalı yapıların anizotropik doğası, bu farkların temel nedenleri arasında yer almaktadır.

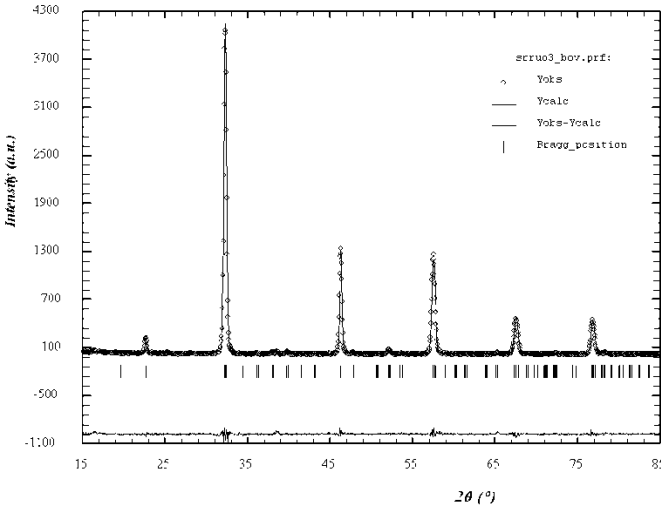
Ara faz olarak sentezlenen $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{RuO}_3$ bileşikler, Sr^{2+} yerine Ca^{2+} iyonunun ikamesi ile kristal yapı ve manyetik düzenlemeler arasındaki ilişkiyi anlamak için önemli bir model sistem sunar. Bu bileşiklerde iyonik yarıçap farkı, kristal simetride gözle görülür değişimlere yol açmakta ve manyetik faz geçişlerini belirgin biçimde etkilemektedir. Ayrıca çalışmada sentezde kullanılan SrCO_3 bileşiği, manyetik olarak pasif aragonit tipi yapısıyla referans sistem olarak ele alınmış ve kristal stabilitesi bakımından karşılaştırılmıştır.

Sonuç olarak, SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 bileşikler arasında gözlemlenen fiziksel farklılıkların temelinde kristal yapı-parametre ilişkisi, bağ simetrisi ve elektronik yapı gibi yapısal özellikler yatmaktadır. Bu farkların anlaşılması, korelasyonlu elektron sistemlerinde faz mühendisliği, spintronik uygulamalar ve topolojik süperiletkenlik gibi alanlarda kritik bilgiler sunmaktadır.

Bu çalışmada; SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 bileşiklerinin kristal yapılarının ayrıntılı yapısal analizi, faz davranışlarının ve olası yapısal geçişlerin karşılaştırılması, koordinasyon geometrileri ile bağ karakteristiklerinin değerlendirilmesi, kristal stabilitesinin elektronik özellikler üzerindeki etkisi, kristal yapıların manyetik davranış potansiyeliyle ilişkisi, SQUID ve nötron saçılması deneyleriyle elde edilen manyetik verilerin yorumu ve son olarak topolojik süperiletkenlik ile spin bazlı uygulamalar açısından yapısal farkların rolü kapsamlı biçimde ele alınmaktadır. Bu karşılaştırmalı yaklaşım, yapısal parametrelerin fiziksel özellikler üzerindeki etkilerini ortaya koyarak kristal yapı–kuantum faz ilişkisini derinlemesine anlamayı hedeflemektedir.

2. SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 'ün Kristal Yapısı ve Faz Davranışı Karşılaştırılması

SrRuO_3 , oda sıcaklığında ortorombik kristal sistemde kristallenmekte olup (Zhernenkov, M., Fabbri, G., Chmaissem, O., Mitchell, J. F., Zheng, H., & Haskel, D. J., 2013, Yue, C., Zhang, W., Wang, M., Liu, J., Zhang, J., & Hou, D. J., 2022), bu yapı birçok ABO_3 tipi perovskit bileşiği ile benzerlik gösterir. Literatürde SrRuO_3 'ün uzay grubu genellikle Pbnm veya Pnma olarak belirtilmiştir; her iki tanımlama da aslında aynı yapının farklı yönelimleri için kullanılan Hermann–Mauguin sembolleridir ve Uzay Grubu No. 62 ile temsil edilen standart Pnma formuna dönüştürülebilir. Bu dönüşümde birim hücre boyutları korunur, ancak atomların birim hücre içerisindeki koordinatları yeniden düzenlenir.



Şekil 1: SrRuO_3 'ün X-ışını Kırınım Deseninin Gözlemsel ve Uyumlandırılmış Görünümü

SrRuO_3 'ün yapısal iyileştirmesi (refinement) sırasında, Pnma uzay grubuna karşılık gelen konvansiyonel yerleşim esas alınmış ve Ru atomu 4b Wyckoff pozisyonu olan (0, 0, 0.5) koordinatına yerleştirilmiştir. Ru atomunun farklı Wyckoff pozisyonlarına (4a, 4b, 4c) yerleştirilmesi durumunda Sr, O1 ve O2 gibi diğer atomların konumları da buna bağlı olarak değişiklik göstermektedir. Bu yönüyle SrRuO_3 'ün kristal yapısı yalnızca perovskit simetrisinin bir örneği olmakla kalmaz, aynı zamanda yapısal ince ayarlarla değişen fiziksel özelliklerin anlaşılması açısından da önemlidir.

SrRuO₃ bileşiğine ait bu X-ışını kırınım (XRD) deseni, örneğin kristal yapısının Rietveld iyileştirme yöntemiyle analiz edildiğini göstermektedir. Şekil 1’de, deneysel olarak elde edilen kırınım verileri (Y_{obs}) ile teorik modellemeye dayalı olarak hesaplanan desen (Y_{calc}) üst üste çizilmiştir. Grafik alt kısmında yer alan $Y_{obs} - Y_{calc}$ fark eğrisi, model ile deneysel veriler arasındaki farkları yansıtmaktadır. Dikey işaretler (|) ise teorik olarak öngörülen Bragg yansımalarının konumlarını göstermektedir.

Şekil 1’de yüksek yoğunluklu ve keskin piklerin konumları ile şiddetlerinin hesaplanan modelle yüksek oranda uyum göstermesi, SrRuO₃’ün kristal yapısının doğru bir şekilde sentezlenmiş olduğunu göstermektedir. Fark eğrisinin genellikle sifıra yakın seyretmesi, yapısal parametrelerin güvenilirliğini destekler niteliktedir. Bragg konumlarına karşılık gelen tüm kırınım piklerinin deneysel veride gözlemlenmesi, örneğin tek fazlı ve kristalografik olarak saf bir SrRuO₃ bileşiği olduğunu ortaya koymaktadır.

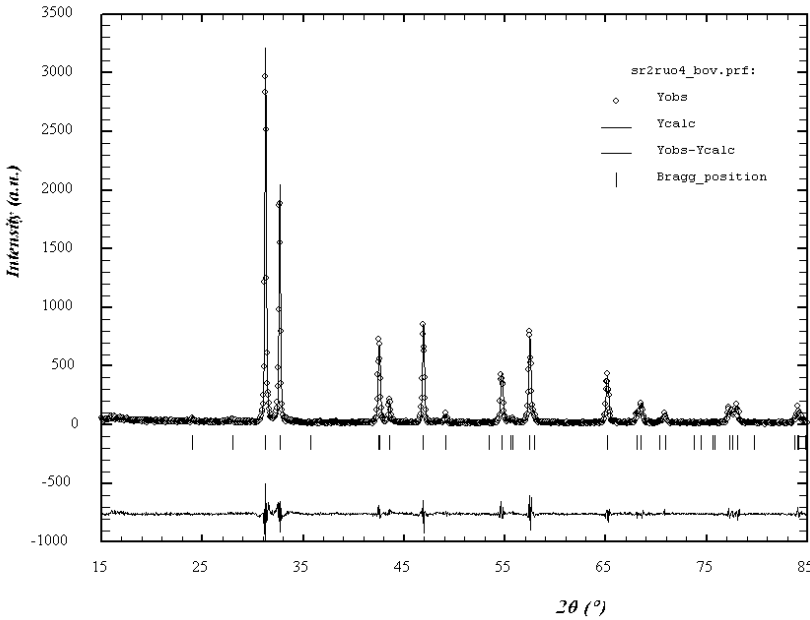
Bu yapısal analiz, SrRuO₃’ün oda sıcaklığında ortorombik kristal sistemde (Pnma, Uzay Grubu No. 62) kristallendiğini ve literatürde sıkça referans verilen distorsiyonlu perovskit yapısını doğruladığını göstermektedir (Dirsyte, R., Schwarzkopf, J., Schmidbauer, M., Wagner, G., Irmischer, K., Anooz, S. B., & Fornari, R., 2011, Wakabayashi, Y. K., Kaneta-Takada, S., Krockenberger, Y., Taniyasu, Y., & Yamamoto, H., 2021, Gan, Q., Rao, R. A., Eom, C. B., Garrett, J. L., & Lee, M.1998). Kristalin yüksek kalitesi, kırınım desenindeki netlik ve uyumdan açıkça anlaşılmaktadır. Elde edilen bu veriler, SrRuO₃’ün ferromanyetik özelliklerinin kökeninde yatan yapısal düzenin doğrudan kanıtı niteliğindedir.

Sr₂RuO₄, K₂NiF₄ tipi tabakalı perovskit yapısına sahip olup Ruddlesden–Popper serisinin $n = 1$ üyesidir (Huang, W., 2021, Maeno, Y., Ikeda, A., & Mattoni, G., 2024, Leggett, A. J., & Liu, Y. J., 2021, Mackenzie, A. P., & Maeno, Y., 2003). Kristal yapısı tetragonal I4/mmm (Uzay Grubu No. 139) simetrisi ile tanımlanır ve birim hücrede iki formül birimi ($Z = 2$) bulunur. Yapının kafes parametreleri deneysel olarak $a = b \approx 3.8606 \text{ Å}$, $c \approx 12.7066 \text{ Å}$ olarak ölçülmüştür. Bu yapı, yüksek simetriye sahip olması ve belirgin düzlemsel tabakalaşmasıyla kuazi-iki boyutlu elektronik davranışlara zemin hazırlar.

Sr₂RuO₄’ün sentezi, katihâl reaksiyonu yöntemiyle gerçekleştirilmekte olup başlıca başlangıç maddeleri arasında stronsiyum karbonat (SrCO₃) ve rutenyum (IV) oksit (RuO₂) yer alır. RuO₂, sentez açısından kritik bir öncül bileşik olup P4₂/mmn uzay grubunda tetragonal yapıda kristallenir. Ticari olarak temin edilen RuO₂, çoğunlukla kristal yapısına entegre su içeren hidrat formdadır; bu nedenle

kullanılmadan önce 800 °C gibi yüksek sıcaklıkta ısıtılarak faz saflığı sağlanır. Isıl işlem sonrası RuO₂'nin yapısı X-ışını kırınımı (XRD) ile doğrulanır ve bu yapı, Sr₂RuO₄'ün oluşumunda yer alan RuO₆ oktaedralarının temel yapı taşı olarak görev yapar.

Kristal dizilimde Sr²⁺ iyonları, tabakalar arasında dokuz oksijenle koordineli biçimde düzenli olarak yer alır. Ru⁴⁺ iyonları ise altı oksijen atomu ile çevrilerek RuO₆ oktaedralarını oluşturur. Bu oktaedralar, tabaka düzleminde köşe paylaşarak iki boyutlu bir ağ yapısı meydana getirir. Oksijen atomları hem Ru hem de Sr iyonlarıyla bağ kurarak üç boyutlu kristal ağın bütünlüğünü sağlar. Yapıdaki bu düzenleme, Sr₂RuO₄'ün karakteristik kuazi-iki boyutlu elektronik özelliklerinin temelini oluşturur.



Şekil 2: Sr₂RuO₄'ün deneysel ve hesaplanmış X-ışını kırınım desenleri

Şekil 2'de görüldüğü gibi, referans parametreleri ile iyileştirme sonucunda elde edilen değerler arasında mükemmel bir uyum vardır. (Dang, H. T., Mravljje, J., Georges, A., & Millis, A., 2015)

Elektronik yapı bakımından Sr₂RuO₄, Ru t_{2g} orbitallerinden (d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}) oluşan üç Fermi bandına (α, β, γ) sahiptir. Özellikle d_{xy} karakterli γ bandı, kuazi-iki boyutlu yapısıyla silindirik bir Fermi yüzeyi oluşturarak taşıyıcıların

hareketinde belirleyici rol oynar. Bu bant yapısı, Sr_2RuO_4 'ün elektriksel iletkenliği ve süperiletken özellikleri açısından kritiktir.

Deneyssel veriler, Sr_2RuO_4 'ün $T_p \approx 0.93$ K civarında süperiletken hale geçtiğini göstermektedir. Bu durum, klasik BCS teorisinin ötesinde, spin-triplet (p-dalga) eşleşme ile açıklanmakta ve zaman-ters simetrisinin bozulabileceği öne sürülmektedir. Sr_2RuO_4 , bu nedenle kuprat dışı ilk tabakalı perovskit süperiletken olarak literatürde özel bir yere sahiptir.

Ayrıca yapıya uygulanan tek eksenli basınç (özellikle [100] yönünde) T_p değerini 3.3 K'ye kadar yükseltebilmekte; bu durum Van Hove singulariteleri gibi band yapısına duyarlı mekanizmaların süperiletkenlik üzerinde etkili olduğunu göstermektedir. Sr_2RuO_4 , Fermi seviyesi yakınında yer alan bu singularitelere karşı oldukça hassastır; dolayısıyla küçük yapısal değişiklikler bile süperiletken faz sınırlarını etkileyebilir.

Faz diyagramı çalışmaları, elastokalorik ölçümler ve muon spin relaksasyonu (μSR) gibi deneyssel yöntemler, Sr_2RuO_4 'ün hem süperiletken hem de manyetik faz sınırlarına yakın bir kuantum kritik bölgede konumlandığını göstermektedir. G-tip spin fluktuasyonlarının varlığı, teorik spin-triplet eşleşme modellerini desteklemektedir.

Son dönem araştırmaları, Sr_2RuO_4 'ün yüksek basınç altında ve epitaksiyel ince film formlarında topolojik süperiletkenlik potansiyeli taşıdığını ortaya koymuştur. Kuazi-iki boyutlu Fermi yüzeyleri ve taşıyıcıların düşük boyutlu dağılımı, bu malzemeyi Majorana fermiyonları gibi egzotik kuasiparçacıkların incelenmesinde öncü bir model sistem hâline getirmektedir. Bu yönüyle Sr_2RuO_4 , hem temel kuantum fiziği çalışmaları hem de ileri teknoloji uygulamaları için eşsiz bir malzeme olarak öne çıkmaktadır.

SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 bileşikleri kimyasal olarak ortak Sr^{2+} iyonunu içermelerine rağmen, kristal yapıları, anionik çevreleri ve fiziksel davranışları bakımından önemli farklılıklar sergiler. Bu farklılıklar, yalnızca yapısal simetriye değil, aynı zamanda bağ türlerine, faz geçişlerine ve elektronik/manyetik işlevlere de yansımaktadır.

SrRuO_3 , distorsiyonlu perovskit yapıda olup oda sıcaklığında Pnma (veya eşdeğer Pbnm) uzay grubunda kristallenir. Kristal yapısında Ru^{4+} iyonları altı oksijen atomuyla çevrilerek RuO_6 oktaedrarlarını oluşturur. Bu oktaedrarlar, yapının iç simetrisini bozacak şekilde eğilmiş ve döndürülmüştür. Sr^{2+} iyonları ise bu yapı içerisinde perovskit A-yerine oturur. SrRuO_3 , itinerant ferromanyetik bir sistem olup Curie sıcaklığı yaklaşık 162 K'dir. GdFeO_3 tipi distorsiyonlar

sonucu Ru–O–Ru bağ açıları $\sim 180^\circ$ 'den saparak bant genişliğini daraltır ve Stoner kriterine uygun olarak ferromanyetizmayı stabilize eder. Yapının XRD analizinde elde edilen kırınım deseni, tek fazlı kristallik ve yüksek yapısal bütünlük ile uyumludur.

Sr_2RuO_4 , Ruddlesden–Popper serisinin $n=1$ üyesi olarak K_2NiF_4 tipi tabakalı perovskit yapıya sahiptir. Tetragonal $I4/mmm$ (Uzay Grubu No. 139) simetrisinde kristallenir. Yapısal olarak köşe paylaşan RuO_6 oktaedraları c-eksenine dik düzlemlerde iki boyutlu katmanlar oluşturur; Sr^{2+} iyonları bu katmanlar arasında konumlanır. Yapının yüksek simetrisi ve kuazi-iki boyutlu doğası, Fermi yüzeyinde d_{x,y} karakterli γ bandı gibi önemli bantların ortaya çıkmasına ve düşük sıcaklıkta $T_C \approx 0.93$ K'de spin-triplet süperiletkenliğin gözlenmesine olanak tanır. Sr_2RuO_4 , klasik BCS süperiletkenlerinden farklı olarak, zaman-ters simetrisini kırabilecek p-dalga eşleşme ile dikkat çeker.

Sonuç olarak, SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 bileşikleri, aynı Sr bileşeni etrafında şekillenen iki farklı kristal mimari ve fiziksel davranış örneği sunar. Bu karşılaştırma, kristal yapının yalnızca atomların diziliş biçimi değil, aynı zamanda malzemenin elektronik, manyetik ve süperiletken özelliklerini belirleyen temel bir parametre olduğunu açıkça ortaya koymaktadır.

3. Kristal Stabilitésinin Elektronik Özelliklere Etkisi: SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 'ün Karşılaştırması

Malzemelerin kristal yapısı yalnızca geometrik düzeni değil, aynı zamanda taşıdığı elektronik, manyetik ve süperiletken özellikleri doğrudan etkileyen bir faktördür. SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 bileşikleri, kimyasal olarak Sr içermeleri nedeniyle benzerlik gösterebilirler de, kristal simetri, bağ karakteri ve yapısal anizotropi bakımından önemli ölçüde farklılık sergilerler. Bu farklılıklar, elektronik taşıyıcılık, manyetik düzen ve kuantum faz davranışları gibi fiziksel özelliklerde belirgin sonuçlar doğurur.

SrRuO_3 , distorsiyonlu perovskit yapısıyla (Pnma) elektron korelasyonları ve manyetik geçişler açısından zengin bir sistemdir. GdFeO_3 tipi yapısal distorsiyonlar, RuO_6 oktaedrağını eğip döndürerek Ru–O–Ru bağ açılarını ideal 180° 'den uzaklaştırır. Bu kırılmalar t_{2g} bant genişliğini daraltır, elektron korelasyonlarını güçlendirir ve Stoner kriterinin sağlanmasına olanak tanır. Sonuç olarak SrRuO_3 , $T_C \approx 162$ K sıcaklığında ferromanyetik metalik bir faza sahiptir. Elektronik bant yapısı lokalize-itinerant sınırda olup, yapısal bozulmalara karşı duyarlıdır. Bu yapıdaki stabilite, spinle bağlantılı iletkenliğe ve manyetik düzene elverişli bir ortam sunar.

Sr_2RuO_4 ise K_2NiF_4 tipi tabakalı perovskit yapısına sahip, yüksek simetri ($I4/mmm$) ve kuazi-iki boyutlu karaktere sahip bir bileşiktir. Kristal yapısının anizotropik yapısı, özellikle a–b düzlemi boyunca elektron taşınımına olanak sağlarken, c-ekseninde taşıyıcılık zayıftır. RuO_6 oktaedralarındaki küçük açısall sapmalar bile elektronik bant yapısında önemli değişimlere yol açar. Van Hove singularitelerine yakın Fermi yüzeyi, spin-fluctuation temelli etkileşimlerin gelişmesini destekler. Bu yapı sayesinde Sr_2RuO_4 , düşük sıcaklıkta (~ 0.93 K) spin-triplet süperiletkenliğe geçiş yapabilir. Ayrıca, kristal simetrisindeki küçük değişikliklerin bile T_C üzerinde ciddi etkiler yaratması, bu bileşiğin elektronik fazlara karşı son derece hassas olduğunu göstermektedir.

Karşılaştırmalı değerlendirme yapıldığında SrRuO_3 , yapısal distorsiyonlar sayesinde ferromanyetik metalik özellikler gösteren ve spinle ilişkili taşıyıcılığa sahip aktif bir kristal yapıya sahiptir. Sr_2RuO_4 , yüksek simetriye sahip kuazi-iki boyutlu yapısıyla düşük sıcaklıkta süperiletkenlik gibi kuantum faz geçişlerine olanak sağlayan bir sistemdir. Bu iki bileşik, kristal stabilitesinin fiziksel özellikleri nasıl yönlendirdiğine dair çarpıcı örnekler sunar ve SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 yapısal faktörler, spin, bant yapısı ve faz davranışları üzerinde doğrudan belirleyici olur. Böylece kristal yapı, sadece atomların yerleşimini değil; aynı zamanda elektronik temel durumun doğasını belirleyen aktif bir bileşen hâline gelir (Ghosh, S., Shekhter, A., Jerzembeck, F., Kikugawa, N., Sokolov, D. A., Brando, M., Mackenzie, C. W. H., Ramshaw, B., 2021, Lee, B., Kwon, O. U., Shin, R. H., Jo, W., & Jung, C. U., 2014).

4. Koordinasyon Geometrisi ve Bağlanma Karakteristiklerinin Karşılaştırılması

Malzemelerin elektronik, manyetik ve yapısal özellikleri yalnızca kimyasal bileşimlerine değil, aynı zamanda atomların kristal yapı içindeki koordinasyon geometrilerine ve bağ karakteristiklerine doğrudan bağlıdır. SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 bileşikleri Sr içermeleri yönüyle benzerlik gösterse de, iyonların koordinasyon çevresi, bağ yapısı ve bu bağların fiziksel fonksiyonlara katkısı bakımından belirgin biçimde farklılaşırlar.

SrRuO_3 , distorsiyonlu perovskit yapısıyla $Pnma$ simetrisinde tanımlanır ve yapısal olarak GdFeO_3 tipi distorsiyonlar sergiler. Bu yapıda Ru^{4+} iyonları altı oksijen atomu ile koordineli olarak RuO_6 oktaedralarını oluşturur. Sr^{2+} iyonları ise dokuz oksijenle çevrilidir ancak SrCO_3 'e kıyasla daha düzensiz bir geometriye sahiptir. Ru–O bağları iyonik ve kovalent karakterin bir birleşimini taşır. Yapısal distorsiyonlar sonucu Ru–O–Ru bağ açıları 180° 'den sapar; bu durum t_{2g} bantlarının daralmasına, elektron korelasyonlarının artmasına ve ferromanyetik

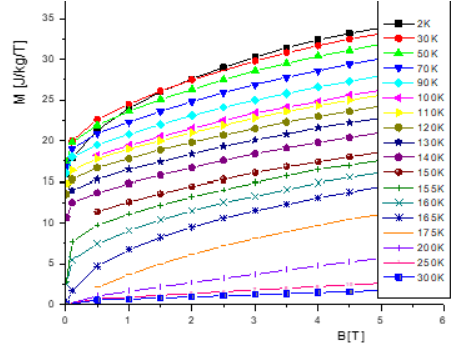
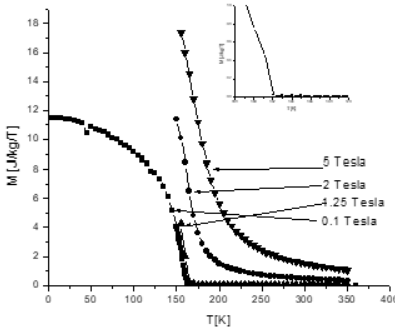
düzene olanak tanır. Bu bağlanma yapısı, SrRuO_3 'ün metallic ferromanyetik davranış göstermesinde kritik rol oynar.

Sr_2RuO_4 , K_2NiF_4 tipi tabakalı perovskit yapısıyla tetragonal $I4/mmm$ simetrisinde kristallenir. Burada Ru^{4+} iyonları da altı oksijenle çevrilerek RuO_6 oktaedralarını oluşturur, ancak bu oktaedralar SrRuO_3 'tekine göre daha düzenlidir ve daha az distorsiyon içerir. Sr^{2+} iyonları yine dokuz oksijenle çevrilidir fakat bu koordinasyon SrCO_3 'ten daha gevşek ve daha az simetriktir. Sr_2RuO_4 'teki $\text{Ru}-\text{O}$ bağları yaklaşık 1.95–2.02 Å, $\text{Sr}-\text{O}$ bağları ise 2.6–2.7 Å civarındadır. Yapının anizotropik doğası, özellikle RuO_6 düzlemlerinde yüksek taşıyıcılık sağlarken, spin-fluctuation etkileriyle kuantum fazlara zemin oluşturur. Bu bağ topolojisi, düşük sıcaklıkta ortaya çıkan spin-triplet süperiletkenlik davranışının temelini teşkil eder.

SrRuO_3 'teki $\text{Ru}-\text{O}$ bağları, hem manyetik hem de iletkenlik özelliklerine doğrudan katkı sağlar. Distorsiyon sonucu oluşan bağ sapmaları, itinerant ferromanyetizmanın ortaya çıkmasına olanak tanır. Sr_2RuO_4 'te bağ yapısı daha düzenli ve simetriktir. Özellikle $\text{Ru}-\text{O}$ bağlarının anizotropik yönlenmesi, spin-yörünge etkileşimlerini destekleyerek spin-triplet süperiletkenliğe zemin hazırlar. SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 'te bağlanma geometrisi, sistemin elektronik, manyetik ve süperiletken özelliklerini doğrudan yönlendiren aktif bir bileşen olarak öne çıkar. Bu karışıklık, yapısal koordinasyonun sadece statik bir mimari değil, aynı zamanda fonksiyonel bir belirleyici olduğunu göstermektedir (Yanase, Y., Takamatsu, S., & Udagawa, M., 2014, Contreras, P., Burgos, J., Ochoa, E., Uzcategui, D., & Almeida, R., 2014, Grutter, A., Wong, F., Arenholz, E., Liberati, M., & Suzuki, Y, 2010).

5. Manyetik Davranış Potansiyeli Açısından Kristal Yapıların Değerlendirilmesi

SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 bileşikleri, kristal yapılarındaki simetri, bağlanma düzeni ve içerdiği iyonların elektron konfigürasyonları doğrultusunda oldukça farklı manyetik davranış potansiyelleri sergilemektedir. Bu farklılıklar, özellikle Süperiletken Kuantum Girişim Cihazı (SQUID) kullanılarak yapılan yüksek hassasiyetli ölçümlerle belirgin şekilde ortaya konmuştur. 10^{-8} e.m.u. (10^{-11} J·T⁻¹) çözünürlüğe sahip bu yöntem, çok düşük manyetik momentlere sahip örneklerde dahi güvenilir analiz imkânı sunmaktadır (Rondinelli, J. M., & Spaldin, N. A., 2011, Yonezawa, S., Kajikawa, T., & Maeno, Y., 2014, Maeno, Y., Yonezawa, S., & Ramires, A., 2024, Suh, H. G., Menke, H., Brydon, P. M. R., Timm, C., Ramires, A., & Agterberg, D. F., 2020).

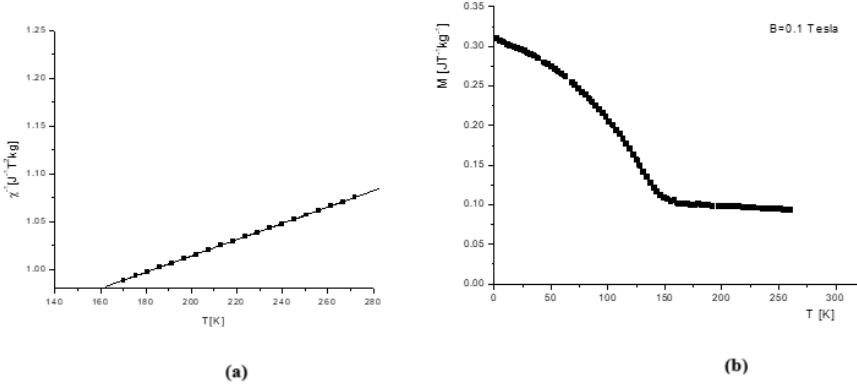


Şekil 3: (a) SrRuO_3 'ün mıknatıslanmasının, 0.1, 1.25, 2 ve 5 Tesla uygulanan manyetik alanlar altında sıcaklığa bağlı olarak değişimidir. (b) Farklı sıcaklıklarda SrRuO_3 'ün uygulanan manyetik alana bağlı olarak mıknatıslanma davranışdır.

Şekil 3 (a), SrRuO_3 bileşiğinin farklı sabit manyetik alanlar (0.1, 1.25, 2 ve 5 Tesla) altında mıknatıslanmasının sıcaklığa bağlı olarak nasıl değiştiğini göstermektedir. Düşük alan değerlerinde (özellikle 0.1 T ve 1.25 T), belirgin bir manyetik faz geçişi gözlemlenmekte olup, bu geçiş yaklaşık 162 K civarında gerçekleşmektedir. Bu sıcaklık, SrRuO_3 'ün Curie sıcaklığı (T_n) olarak tanımlanabilir. Faz geçişi sırasında mıknatıslanma değerinde ani bir azalma oluşmakta ve bu durum sistemin ferromanyetik fazdan paramanyetik faza geçişini işaret etmektedir. Manyetik alan şiddeti arttıkça (örneğin 5 T), mıknatıslanma değerleri daha yüksek kalmakta ve faz geçişi daha geniş bir sıcaklık aralığına yayılmaktadır. Bu da uygulanan manyetik alanın ferromanyetik düzene olan katkısını açıkça göstermektedir. Şekil 3 (b) ise, farklı sıcaklıklarda SrRuO_3 'ün uygulanan manyetik alana (0–5 T) karşılık mıknatıslanma tepkisini göstermektedir. Düşük sıcaklıklarda (örneğin 2 K–90 K) mıknatıslanma ile manyetik alan arasında doğrusal olmayan, doygunluğa yaklaşan bir ilişki gözlenmektedir. Bu durum ferromanyetik düzende manyetik momentlerin yönelmesinden kaynaklanmaktadır. Sıcaklık arttıkça eğrilerin eğimi azalmaktadır ve 300 K gibi yüksek sıcaklıklarda mıknatıslanma neredeyse doğrusal bir davranış sergilemektedir, bu da sistemin paramanyetik rejime geçtiğini göstermektedir.

Bu iki grafik birlikte değerlendirildiğinde, SrRuO_3 'ün klasik bir itinerant ferromanyetik davranış sergilediği açıkça görülmektedir. Curie sıcaklığının altında, sistem yüksek mıknatıslanma değerlerine sahipken, sıcaklık arttıkça manyetik momentlerin yönelimi bozulmakta ve mıknatıslanma değerleri düşmektedir. Ayrıca, mıknatıslanma-alan eğrilerinin doygunluğa ulaşması,

sistemdeki momentlerin kolektif olarak hizalandığını ve manyetik doyuma ulaşıldığını gösterir. Bu davranış, SrRuO_3 'ün yapısındaki Ru^{4+} iyonlarının $4d^4$ konfigürasyonu, orbital örtüşme ve kristal simetrisinin sonucu olarak ortaya çıkmakta olup, spin bazlı elektronik uygulamalar açısından önemli bir manyetik profil sunmaktadır.



Şekil 4: (a) Sr_2RuO_4 için 0.1 Tesla uygulanan manyetik alan altında mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlı değişimidir. (b) Sr_2RuO_4 'ün ters kütleye göre manyetik duyarlılığının sıcaklığa bağlı grafiği. Bu grafik, mıknatıslanma-sıcaklık grafiğinden elde edilmiştir.

Sr_2RuO_4 'ün 0.1 Tesla manyetik alan altında yapılan mıknatıslanma ölçümünde, elde edilen sinyalin oldukça düşük olması dikkat çekicidir. Bu düşük mıknatıslanma, doğrudan SrRuO_3 fazına ait yaklaşık %1 oranında bulunan bir safsızlık fazından kaynaklanmaktadır. Bu miktar X-ışını kırınımı (XRD) veya nötron saçılması gibi yapısal analizlerle tespit edilemeyecek kadar az olsa da, SQUID gibi yüksek hassasiyetli yöntemlerle yapılan manyetik ölçümlerde belirgin bir etki yaratmaktadır. Şekil 4 (a)'da, Sr_2RuO_4 'ün mıknatıslanmasının sıcaklığa bağlı değişimi gösterilmiştir. Mıknatıslanma değerlerinin oldukça küçük olması, bileşiğin manyetik bir düzen sergilemediğini göstermektedir. Ölçüm sıcaklık aralığında (yaklaşık 2–300 K) herhangi bir manyetik faz geçişi ya da düzenli spin hizalanması gözlenmemiştir. Bu durum, literatürde de belirtildiği gibi Sr_2RuO_4 'ün manyetik olarak düzenlenmeyen bir yapı sergilediğini doğrulamaktadır. Şekil 4 (b)'de ise ters kütleye göre normalize edilmiş manyetik duyarlılık (χ^{-1}) sıcaklığa karşı çizilmiştir. Elde edilen grafik, Curie-Weiss yasasıyla uyumlu doğrusal bir eğilim göstermekte ve Sr_2RuO_4 'ün paramanyetik karakterini teyit etmektedir. Ancak grafikte yer alan eğilimin 162 K civarında keskinleşmesi, SrRuO_3 safsızlık fazının varlığını ortaya koymaktadır. Bu sıcaklık, SrRuO_3 'ün Curie sıcaklığı ile örtüşmektedir ve ana bileşenin değil, örnekteki düşük oranlı ferromanyetik fazın etkisini temsil eder.

Sr_2RuO_4 için 0.1 Tesla manyetik alan altında gerçekleştirilen ölçümler, bu bileşiğin paramanyetik özellik gösterdiğini ve literatürde belirtildiği gibi yalnızca ~ 1.2 K civarında spin-triplet süperiletkenliğe geçtiğini doğrulamaktadır. Şekil 4'te sunulan verilerde gözlemlenen düşük mıknatıslanma sinyali, SrRuO_3 safsızlık fazının iz miktarından kaynaklanmakta olup, bu oran XRD gibi yapısal karakterizasyon yöntemleriyle tespit edilemeyecek düzeydedir. Ancak SQUID gibi yüksek hassasiyetli manyetik ölçüm teknikleri, bu küçük katkıların dahi algılanabilir etkiler yaratabileceğini ortaya koymaktadır.

SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 bileşikleri, kimyasal olarak benzerlik gösterebilirler de, içeriklerindeki iyonların manyetik momentleri, kristal simetrisi ve bağlanma düzenleri nedeniyle oldukça farklı manyetik davranış sergilerler. Bu bileşiklerin manyetik özellikleri, yüksek hassasiyetli bir Süperiletken Kuantum Girişim Cihazı (SQUID) ile yapılan ölçümler aracılığıyla değerlendirilmiştir.

SrRuO_3 , itinerant ferromanyetizma sergileyen bir geçiş metali oksididir. Distorsiyonlu perovskit yapısı (Pnma) içerisinde Ru^{4+} iyonları, $4d^4$ konfigürasyonu sayesinde spin momentini taşır. SQUID ölçümleri, 162 K civarında Curie sıcaklığında belirgin bir ferromanyetik geçişin gerçekleştiğini ortaya koymuştur. Düşük sıcaklıklarda uygulanan manyetik alan altında mıknatıslanma değerleri hızla artarken, yüksek sıcaklıklarda sistem paramanyetik hale geçer. Bu geçiş, Sr-O-Ru bağ açıları, t_{2g} bant genişliği ve kristal simetri kırılmalarıyla doğrudan ilişkilidir. Manyetik momentlerin kolektif hizalanması, bu bileşiği spin bazlı uygulamalarda kullanılabilir kılar.

Sr_2RuO_4 , klasik manyetik fazlardan farklı olarak, düşük sıcaklıklarda (~ 0.93 K) spin-triplet süperiletkenliğe geçiş yapan kuazi-iki boyutlu bir sistemdir. Tetragonal $I4/mmm$ yapısında düzenlenen RuO_6 oktaedreleri, Ru^{4+} iyonlarının $4d^4$ elektronları ile spin fluktuasyonlarına olanak tanıyan bir yapı oluşturur. SQUID ile yapılan mıknatıslanma ölçümlerinde, Sr_2RuO_4 'ün paramanyetik özellik gösterdiği; ancak SrRuO_3 safsızlık fazına bağlı olarak 162 K civarında zayıf bir mıknatıslanma sinyali elde edildiği gözlemlenmiştir. Bu sinyalin, XRD ile tespit edilemeyecek kadar az miktarda SrRuO_3 katkısından kaynaklandığı, ters manyetik duyarlılık grafiğinde Curie-Weiss yasasına uyumlu eğilim ile doğrulanmıştır.

SrRuO_3 : GdFeO_3 -tipi distorsiyonlarla zenginleşmiş perovskit yapısı sayesinde ferromanyetik özellik sergiler. Orbital örtüşme ve bağ simetrisi, $4d$ elektronların manyetik moment oluşturmalarını sağlar. Sr_2RuO_4 : Paramanyetik karakter gösteren, ancak düşük sıcaklıklarda spin-fluctuation kaynaklı spin-triplet

süperiletkenliğe geçebilen bir sistemdir. Anizotropik yapısı ve Fermi yüzeyindeki Van Hove singulariteleri, kuantum faz geçişlerine yatkın bir ortam sunar.

Sonuç olarak, kristal yapıların sadece geometrik dizilimden ibaret olmadığı, aynı zamanda manyetik temel durumları belirleyen aktif yapısal bileşenler olduğu ortaya konmuştur. SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 , yapısal ince ayarlarla yönlendirilebilen manyetik yanıtlarıyla, özellikle spintronik ve kuantum bilgi teknolojileri için önemli araştırma sistemleri olarak değerlendirilmektedir.

6. Nötron Saçılımı Bulguları: Karşılaştırmalı Yapısal ve Manyetik Özellikler

Bu çalışmada SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 örneklerinin manyetik ve yapısal özelliklerini incelemek amacıyla nötron saçılımı ölçümleri, Fransa Grenoble'daki ILL laboratuvarında bulunan D7 difüz saçılım spektrometresi kullanılarak gerçekleştirilmiştir. D7, özellikle katı maddelerde düzensizlikten kaynaklanan difüz saçılmayı incelemek için tasarlanmış olup, üç yönlü polarizasyon analizi yapabilen çok dedektörlü bir sisteme sahiptir. Bu özellik, nükleer ve manyetik saçılma bileşenlerinin birbirinden ayrılmasını mümkün kılmıştır.

Deneylerde soğuk nötron kaynağından elde edilen tek renkli nötron demeti, örnek üzerine yönlendirilmiş ve saçılan nötronların şiddeti çok kanallı dedektörler yardımıyla ölçülmüştür. Polarizasyon analizi sayesinde spin-flip ve non-spin-flip saçılma bileşenleri ayrı ayrı kaydedilmiş, böylece elde edilen verilerden manyetik katkılar güvenilir biçimde ayrıştırılmıştır. Ölçümlerin ardından ham veriler, ILL tarafından geliştirilen LAMP yazılımı kullanılarak dedektör verimliliği, arka plan düzeltmesi ve çoklu saçılma gibi standart düzeltmelerden geçirilmiş ve kesin kesit değerleri hesaplanmıştır.

Deneyler, D7 spektrometresi ile SrRuO_3 (18.1 g) ve Sr_2RuO_4 (9.5 g) toz örnekleri üzerinde gerçekleştirilmiştir. Kullanılan nötron dalga boyu 5.9 Å olup, SrRuO_3 için 170 K, 300 K ve 535 K; Sr_2RuO_4 için ise 2 K, 20 K, 50 K ve 450 K sıcaklıklarında ölçümler yapılmıştır. Örnekler helyum atmosferi altında ince duvarlı alüminyum hücrelere yerleştirilmiş, tüm veriler vanadyum standardına göre normalize edilerek mutlak ölçeğe taşınmıştır.

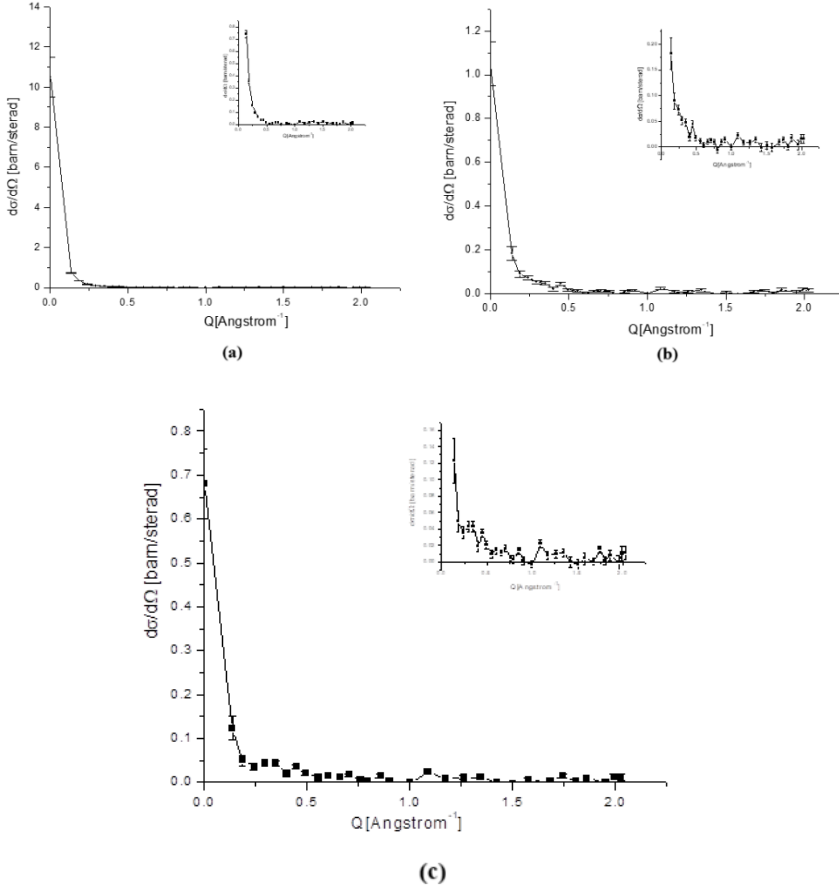
SrRuO_3 örneği üzerinde 170 K, 300 K ve 535 K sıcaklıklarında nötron saçılımı ölçümleri yapılmıştır. Düşük sıcaklıkta (170 K) küçük dalga vektörlerinde belirgin saçılma pikleri elde edilmiş ve bu durum, güçlü ferromanyetik korelasyonların varlığını ortaya koymuştur. Sıcaklık yükseldikçe bu pikler genişlemiş, yani manyetik korelasyon uzunluğu azalmıştır. Nitekim 170 K'de yaklaşık 83.7 Å olan korelasyon uzunluğu, 300 K'de 75 Å, 535 K'de ise 72 Å

olarak hesaplanmıştır. Bu bulgular, ferromanyetik düzenin kaybolmasına rağmen yüksek sıcaklıklarda dahi kısa menzilli manyetik korelasyonların varlığını kanıtlamaktadır. Bragg yansımalarında belirgin manyetik katkı gözlenmemesi ise, Ru 4d elektronlarının delokalizasyonuna bağlı olarak manyetik form faktörünün yüksek dalga vektörlerinde hızlı azalmasından kaynaklanmaktadır.

Sıcaklık [K]	Uniform Manyetik Duyarlılık [barn/sterad]	Maksimumun Tam Genişliği (FWFM) [$2\pi/\lambda$]	Korelasyon Uzunluğu [$\text{\AA}$]
170	10.50	0.075 (5)	83.73 (5)
300	1.05	0.083 (4)	75.66 (4)
535	0.68	0.085 (4)	73.88 (4)

Tablo 1: $Q = 0$ 'da merkezlenen pike yapılan uyumlamadan elde edilen korelasyon uzunlukları

Tablo 1 SrRuO_3 için farklı sıcaklıklarda elde edilen manyetik korelasyon uzunluklarını göstermektedir. 170 K'de korelasyon uzunluğu yaklaşık 83.7 $\text{\AA}$ iken, sıcaklık 300 K'ye yükseldiğinde $\sim 75 \text{ \AA}$ 'a, 535 K'de ise $\sim 72 \text{ \AA}$ 'a düşmüştür. Bu sonuçlar, ferromanyetik düzenin kaybolmasına rağmen yüksek sıcaklıklarda dahi kısa menzilli manyetik korelasyonların sürdüğünü ortaya koymaktadır.

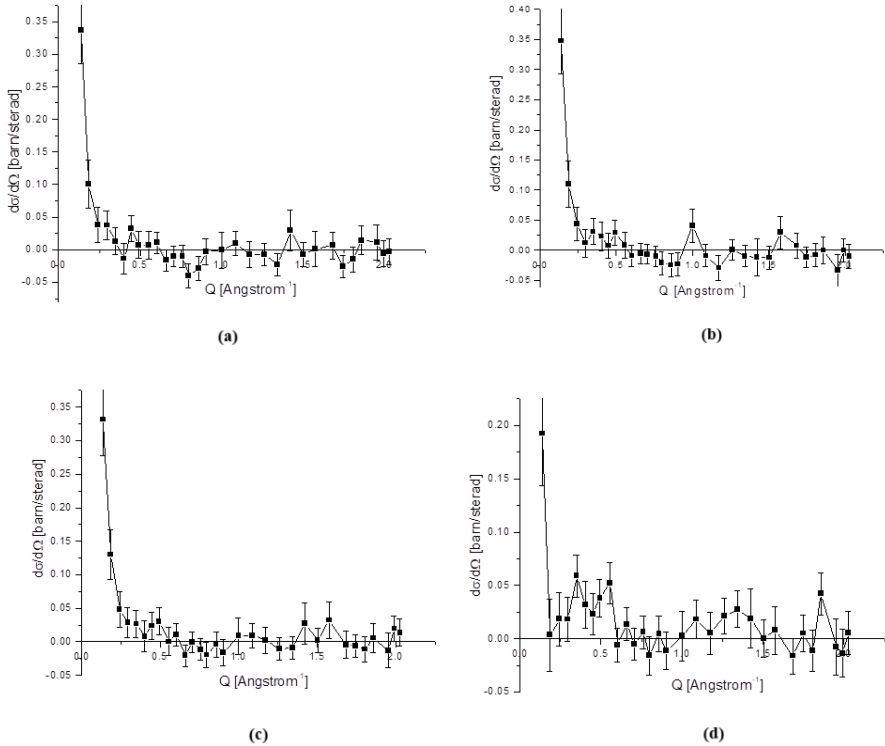


Şekil 5: (a) 170 K’de SrRuO_3 ’ün paramanyetik nötron saçılımı, (b) 300 K’de SrRuO_3 ’ün paramanyetik nötron saçılımı, (c) 535 K’de SrRuO_3 ’ün paramanyetik nötron saçılımıdır.

Şekil 5 (a) 170 K’de SrRuO_3 ’ün paramanyetik saçılımı; küçük dalga vektörlerinde keskin pik $\rightarrow$ ferromanyetik korelasyonların güçlü olduğu gösterilmektedir (korelasyon uzunluğu $\approx 83.7 \text{ \AA}$). (b) 300 K’de saçılım; pik genişlemiş ve korelasyon uzunluğu $\approx 71.4 \text{ \AA}$ ’a düşmüştür, ferromanyetik düzen kaybolmasına rağmen kısa menzilli korelasyonlar devam etmektedir. (c) 535 K’de saçılım; pik genişliği 300 K’ye benzer (korelasyon uzunluğu $\approx 72.3 \text{ \AA}$). Yüksek dalga vektörlerinde Bragg yansımalarında manyetik katkı yoktur; bu durum Ru 4d elektronlarının delokalizasyonuna bağlıdır.

Sr_2RuO_4 bileşiği üzerinde gerçekleştirilen nötron saçılımı ölçümleri 2 K, 20 K, 50 K ve 450 K sıcaklıklarında yapılmıştır. Ancak manyetik ölçümler için

hazırlanan numunede $<1\%$ oranında ferromanyetik SrRuO_3 safsızlığı bulunması nedeniyle, ters manyetik duyarlılık doğru şekilde belirlenememiştir. Bu durum, manyetik korelasyon uzunluğunun hesaplanmasını da engellemiştir. Elde edilen veriler Şekil 6 (a)-(d)'de sunulmaktadır.



Şekil 6: (a) 2 K'de Sr_2RuO_4 'ün paramanyetik nötron saçılımı, (b) 20 K'de Sr_2RuO_4 'ün paramanyetik nötron saçılımı, (c) 50 K'de Sr_2RuO_4 'ün paramanyetik nötron saçılımı (d) 450 K'de Sr_2RuO_4 için paramanyetik nötron saçılımıdır.

Düşük sıcaklıklarda Sr_2RuO_4 'ün kendisi manyetik olarak düzenlenmediği hâlde, küçük dalga vektörlerinde belirgin bir pik gözlenmiştir. Bu keskin pikin kaynağı, manyetik ölçümlerde de ortaya konduğu üzere SrRuO_3 safsızlık fazının ferromanyetik karakteridir. Beklendiği üzere, Sr_2RuO_4 'ün yapısında herhangi bir Bragg yansıması ortaya çıkmamıştır. Bu sonuç, manyetik form faktörünün hızlı düşüşüyle uyumludur ve bileşiğin paramanyetik yapısını koruduğunu göstermektedir.

Literatürde Sr_2RuO_4 'ün saf fazının, düşük sıcaklıklarda (~ 0.93 K) spin-triplet süperiletkenliğe geçtiği ve herhangi bir manyetik düzenlenme göstermediği bilinmektedir. Ancak bu çalışmada kullanılan numunede $<1\%$ oranında SrRuO_3

safsızlığı bulunduğundan, özellikle düşük sıcaklıklarda küçük dalga vektörlerinde gözlenen keskin piklerin kaynağı bu ferromanyetik safsızlık fazıdır. Dolayısıyla, burada elde edilen nötron saçılımı verileri Sr_2RuO_4 'ün saf faz davranışını değil, safsızlık katkısını da içermektedir. Bu ayırımın yapılması, deneysel verilerin literatürle karşılaştırılmasında önemlidir.

Sonuç ve Değerlendirme

Bu çalışmada SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 bileşikleri, kristal yapıları, faz davranışları, elektronik ve manyetik özellikleri ile nötron saçılımı bulguları bakımından karşılaştırmalı olarak incelenmiştir. Ortak Sr^{2+} ve Ru^{4+} iyonlarını barındırmalarına rağmen, yapısal simetri ve koordinasyon geometrilerindeki farklılıklar nedeniyle fiziksel özellikler açısından belirgin ayrılmalar sergilemektedirler.

SrRuO_3 , distorsiyonlu perovskit yapısında kristallenmekte olup ortorombik Pnma uzay grubunda tanımlanır. GdFeO_3 tipi yapısal distorsiyonlar RuO_6 oktaedrollerinin bağ açılarını ideal 180° 'den saptırarak bant genişliğini daraltmakta ve Stoner kriterinin sağlanmasına yol açmaktadır. Bu yapısal özellikler sonucunda SrRuO_3 , yaklaşık 165 K civarında itinerant ferromanyetizma sergileyen bir sistemdir. SQUID ölçümleri ile ferromanyetik–paramanyetik geçiş açık biçimde gözlenmiş, mıknatıslanma–alan eğrileri düşük sıcaklıklarda doygunluğa ulaşarak momentlerin kolektif hizalanmasını ortaya koymuştur. Nötron saçılımı bulguları da bu sonuçları desteklemiştir: 170 K'de küçük dalga vektörlerinde keskin pikler güçlü ferromanyetik korelasyonları göstermiş, korelasyon uzunluğu 83.7 Å olarak hesaplanmıştır. Sıcaklık yükseldikçe (300 K $\rightarrow$ ~75 Å, 535 K $\rightarrow$ ~72 Å) uzunluk azalmış, ancak kısa menzilli korelasyonların varlığı yüksek sıcaklıklarda da sürmüştür. Bragg yansımalarında manyetik katkı gözlenmemesi, Ru 4d elektronlarının delokalizasyonuna bağlanmıştır.

Sr_2RuO_4 , K_2NiF_4 tipi tabakalı perovskit yapısına sahip, tetragonal $I4/mmm$ simetrisinde kristallenmiş bir bileşiktir. Yüksek simetri ve kuazi-iki boyutlu yapısı sayesinde klasik ferromanyetik düzenlenme göstermemekte, ancak düşük sıcaklıklarda (~0.93 K) spin-triplet süperiletkenliğe geçmektedir. Elektronik bant yapısı, üç Fermi yüzeyinden özellikle d_{xy} karakterli γ bandı ile belirlenmekte ve spin-fluctuation temelli eşleşme mekanizmalarına zemin hazırlamaktadır. SQUID ölçümleri, Sr_2RuO_4 'ün paramanyetik doğasını doğrulamış; ancak <%1 oranındaki SrRuO_3 safsızlığı nedeniyle 162 K civarında zayıf bir ferromanyetik sinyal gözlenmiştir. Nötron saçılımı ölçümleri de bu durumu desteklemiştir: 2–450 K arasında yapılan deneylerde, düşük dalga vektörlerinde keskin piklerin

kaynağı safsızlık fazı SrRuO_3 olarak belirlenmiş, Sr_2RuO_4 'ün kendisinde herhangi bir Bragg yansıması gözlenmemiştir. Böylece, bileşiğin paramanyetik yapısını koruduğu ve saf fazının manyetik düzenlenme göstermediği teyit edilmiştir.

Genel olarak, SrRuO_3 ve Sr_2RuO_4 'ün karşılaştırmalı analizi, kristal simetri ve bağlanma karakteristiklerinin, kuantum faz davranışları üzerinde doğrudan belirleyici olduğunu ortaya koymuştur. SrRuO_3 güçlü ferromanyetik korelasyonlarıyla spin bazlı elektronik uygulamalara aday bir sistemken, Sr_2RuO_4 düşük sıcaklıklardaki spin-triplet süperiletkenliği ve kuazi-iki boyutlu Fermi yüzeyi ile topolojik süperiletkenlik ve kuantum bilgi teknolojileri açısından dikkat çekici bir model malzeme konumundadır. Bu bağlamda, çalışmada elde edilen bulgular yalnızca korelasyonlu elektron sistemlerinin temel ilkelerini anlamaya katkı sağlamakla kalmamakta, aynı zamanda ileri teknolojik uygulamalar için de yol gösterici nitelik taşımaktadır.

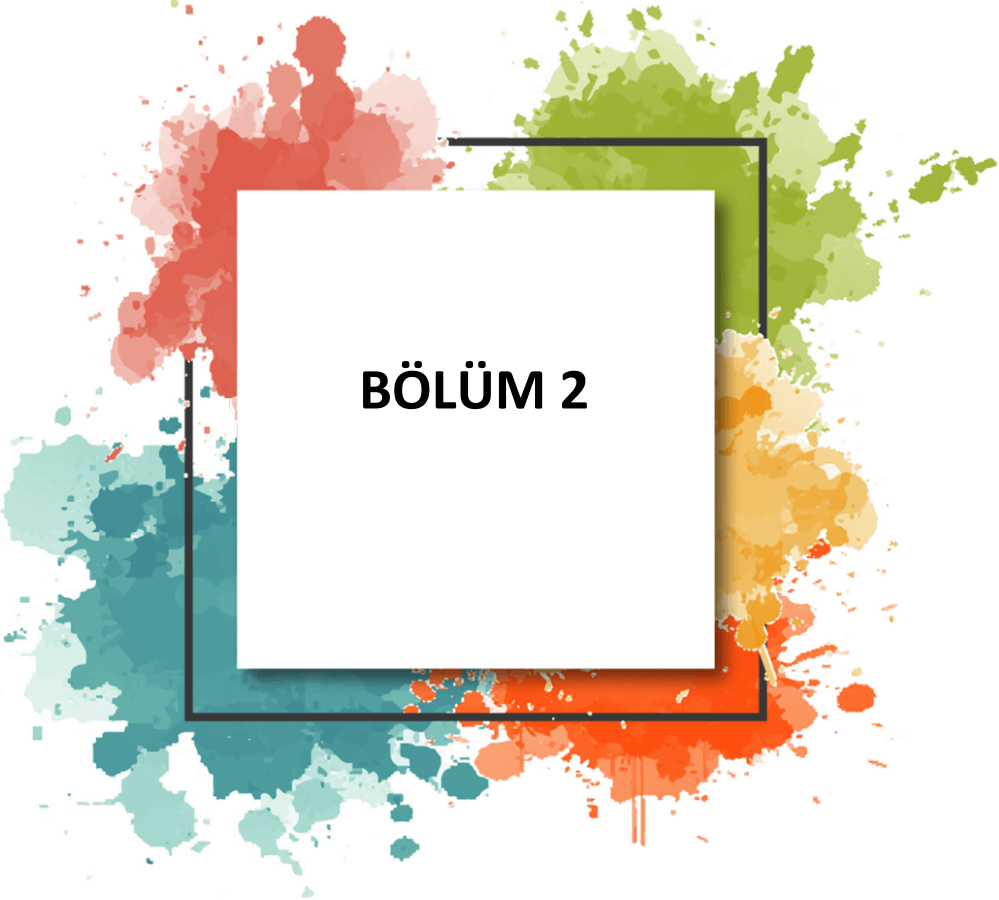
Teşekkür

Bu çalışmadaki veriler Özhan Ünverdi'nin doktora tezi sırasında Loughborough Üniversitesi, Fizik Bölümü ve Laue-Langevin Enstitüsü'ndeki çalışmalar sonucunda elde edilmiştir.

Kaynaklar

- A Pustogow, A., Luo, Y., Chronister, A., Su, Y., S., Sokolov, D., A., Jerzembeck, F., Mackenzie, A., P., C W Hicks, Kikugaw, N., Raghu, S., Bauer, E., D., Brown, S., E., Nature, 574(7776), 72–75 (2019).
- Bednorz, J. G., & Müller, K. A. Z. Phys. B, 64, 189 (1986).
- Contreras, P., Burgos, J., Ochoa, E., Uzcategui, D., & Almeida, R. Rev. Mex. Fís., 60(3), 184–189 (2014).
- Dang, H. T., Mravlje, J., Georges, A., & Millis, A. J. Phys. Rev. B, 91(19), 195149 (2015).
- Dirsyte, R., Schwarzkopf, J., Schmidbauer, M., Wagner, G., Irmischer, K., Anooz, S. B., & Fornari, R. Thin Solid Films, 519(19), 6264–6268 (2011).
- Gan, Q., Rao, R. A., Eom, C. B., Garrett, J. L., & Lee, M. Appl. Phys. Lett., 72(8), 978–980 (1998).
- Ghosh, S., Shekhter, A., Jerzembeck, F., Kikugawa, N., Sokolov, D. A., Brando, M., Mackenzie, C. W. H., Ramshaw, B. J. Nat. Phys., 17(2), 199–204 (2021).
- Grutter, A., Wong, F., Arenholz, E., Liberati, M., & Suzuki, Y. J. Appl. Phys., 107(9) (2010).
- Huang, W. Chin. Phys. B, 30(10), 107403 (2021).
- Jung, C. U. J. Magnetism, 28(3), 230–233 (2023).
- Kiyama, T., Yoshimura, K and Kosuge, K., Phys. Rev. B, 54, R756 (1996).
- Lee, B., Kwon, O. U., Shin, R. H., Jo, W., & Jung, C. U. Nanoscale Res. Lett., 9(1), 8 (2014).
- Leggett, A. J., & Liu, Y. J. Supercond. Nov. Magn., 34(6), 1647–1673 (2021).
- Longo, M, KJ., Raccah, P., M., Goodenough, J., B., J. Appl. Phys., 39, 1327 (1968).
- Mackenzie, A. P., & Maeno, Y. Rev. Mod. Phys., 75(2), 657 (2003).
- Maeno, Y., Ikeda, A., & Mattoni, G. Nat. Phys., 20(11), 1712–1718 (2024).
- Maeno, Y., Yonezawa, S., & Ramires, A. J. Phys. Soc. Jpn., 93(6), 062001 (2024).
- Oguchi, T. Phys. Rev. B, 51, 1385 (1995).
- Pooja, K, Saha, B., Choudhary, N., Maji, P., K., Bera, A., K., Yusuf, S., M., Sow, C., Phys. Rev. B, 109(14), 144404 (2024).
- Randal, J. J., Roland, W., J. Am. Chem. Soc., 81, 2629 (1959).
- Rondinelli, J. M., & Spaldin, N. A. Adv. Mater., 23(30), 3363–3381 (2011).
- Shikano, M. Solid State Commun., 90, 115 (1994).

- Suh, H. G., Menke, H., Brydon, P. M. R., Timm, C., Ramires, A., & Agterberg, D. F. *Phys. Rev. Res.*, 2(3), 032023 (2020).
- Wakabayashi, Y. K., Kaneta-Takada, S., Krockenberger, Y., Taniyasu, Y., & Yamamoto, H. *ACS Appl. Electron. Mater.*, 3(6), 2712–2719 (2021).
- Walz, L., & Lichtenberg, F. *Acta Cryst. C*, 49, 1268 (1993).
- Yanase, Y., Takamatsu, S., & Udagawa, M. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 83(6), 061019 (2014).
- Yonezawa, S., Kajikawa, T., & Maeno, Y. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 83(8), 083706 (2014).
- Yue, C., Zhang, W., Wang, M., Liu, J., Zhang, J., & Hou, D. *J. Solid State Chem.*, 309, 122998 (2022).
- Zhernenkov, M., Fabbris, G., Chmaissem, O., Mitchell, J. F., Zheng, H., & Haskel, D. *J. Solid State Chem.*, 205, 177–182 (2013).



BÖLÜM 2

Kuantum Dolanıklık ve Uzay-Zaman

Emine Canan Günay Demirel¹

Giriş

Kuantum dolanıklığı, çok bileşenli kuantum sistemlerinin durum uzayını tanımlayan temel özelliklerden biridir. Klasik fizikteki ayrılabilirlik ve yerel gerçekçilik ilkelerine doğrudan aykırı bir durumdur. İlk olarak Erwin Schrödinger'e göre dolanıklık; birleşik bir kuantum sisteminin fiziksel durumunun, onu oluşturan alt sistemlerin bağımsız kuantum durumlarına indirgenemezliği olarak tanımlanır. Bu indirgenemezlik, ölçüm sonuçları arasındaki güçlü korelasyonlarla sınırlı değildir; aynı zamanda kuantum durum uzayının tensör-çarpım yapısında bulunan temel bir yapısal özelliği de yansıtır. Bu durumda, dolanıklık, fiziksel gerçekliğin en temel düzeyde ilişkisel bir karaktere sahip olduğunu ortaya koyar ve klasik yerel gerçekçilik varsayımlarının sınırlamalarını açıkça gösterir. Dolanıklık, kuantum sistemlerinin alt bileşenleri arasında paylaşılan bilginin yerel tanımlarla tam olarak açıklanamamasından kaynaklanır. Bir alt sistem birleşik sistemden bağımsız olarak ele alındığında, ortaya çıkan tanım genellikle eksik bir bilgi içeriği sunar. Bu durum, dolanıklığın esasen epistemolojik bir olgu olduğunu ve ortaya çıkan korelasyonların klasik olasılık teorisi çerçevesinde yeniden üretilmeyeceğini göstermektedir. Bu açıdan dolanıklık, klasik korelasyonlardan yalnızca niceliksel olarak değil, niteliksel olarak da farklılık göstermektedir.

Kuantum bilgi teorisi perspektifinden bakıldığında, dolanıklık, operasyonel olarak kullanılabilen ancak belirli fiziksel kısıtlamalar altında korunamayan bir kaynak olarak kabul edilir. Yerel işlemler ve klasik iletişim yoluyla artırılmayan bu kaynak, kuantum iletişim protokollerinin verimliliğini, kuantum hesaplamanın sağladığı ivmeyi ve hata düzeltme şemalarının performans sınırlarını belirleyen temel bir unsur haline gelmiştir. Bu çerçevede geliştirilen dolanıklık kriterleri, çok parçacıklı sistemlerdeki kuantum korelasyonlarının yapısını sınıflandırmada ve kuantum faz geçişleri gibi kolektif olayları anlamada merkezi bir rol oynamaktadır [5–8].

Ancak, dolanıklığın fiziksel önemi operasyonel uygulamalarla sınırlı değildir. Son teorik yaklaşımlar, dolanıklığı uzay-zamanın mikroskobik kökeninin incelenmesinde bir yapı oluşturma ilkesi olarak ele almaktadır. Bu perspektifte, uzay-zaman geometrisi önceden verilmiş bir arka plan olarak değil, daha temel

¹ Dr. Öğr. Üyesi, Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi Teknik Bilimler Meslek Yüksek Okulu- Elektrik ve Enerji Bölümü, ORCID: 0000-0003-2968-9780

kuantum derecelerinin dolanıklık yapısından türetilen etkili bir açıklama olarak yorumlanır. Özellikle kuantum alan teorilerinde gözlemlenen dolanıklık ölçeklendirmesi, geometrik yüzeyler ve bilgi içeriği arasında derin ve sistematik bir ilişkiyi ortaya koymaktadır [2–4,9].

Holografik yaklaşımlar bu ilişkiyi daha ileri bir seviyeye taşıyarak geometrik niceliklerin doğrudan dolanıklık kriterleriyle ilişkilendirilebileceğini göstermiştir. Alan, mesafe ve hacim gibi klasik geometrik kavramlar, kuantum durumları arasındaki korelasyon yapısının makroskopik yansımaları olarak yeniden değerlendirilmektedir. Dolanıklık yapısındaki bozulmalara karşılık gelen geometrik yapıların anlamının kaybolmasına yol açması, yerel alanlardan ziyade ilişkisel bilgi ağlarının uzay-zamanın temelini oluşturduğu fikrini güçlendirmektedir [2–4,9–15].

Bu yaklaşım aynı zamanda zaman kavramının ontolojik statüsünün yeniden incelenmesini de gerektirmektedir. Bu çerçevede zaman, evrensel ve dışsal bir parametre olarak değil, dolanıklık yapılarındaki yeniden düzenlemelerin ve bilgi akışının yönlü karakterinin bir sonucu olarak ortaya çıkar. Böylece nedensellik ve zamansal sıralama temel ve öncül kavramlar olmaktan çıkarak türetilmiş yapılar haline gelir. Bu bakış açısı, kuantum yerçekimi teorilerinde sıklıkla karşılaşılan zaman problemine bir çözüm sunmaktadır [1–24].

Kuantum dolanıklığı kuantum mekaniğinde ikincil veya marjinal bir özellik değildir; Hilbert uzayının yapısından kaynaklanan ve fiziksel gerçekliğin bilgi, geometrik, termodinamik ve nedensel boyutlarını içinde birleştiren temel bir ilkedir. Bu nedenle, dolanıklık yalnızca kuantum bilgi işleme süreçleri için değil, aynı zamanda uzay-zamanı anlamak için de büyük bir öneme sahiptir [1–24].

Klasik Uzay-Zamanın Geometrisi

Newton evreninde, uzay ve zaman, fiziksel süreçlerden bağımsız, mutlak ve evrensel bir arka plan olarak kabul edilir. Bu yaklaşımda, uzamsal ayrım ve zamansal akış, gözlemcinin konumundan veya maddenin içeriğinden etkilenmeyen, önceden tanımlanmış ve değişmeyen yapılardır. Bu paradigma, Isaac Newton fiziğinin deterministik yapısıyla tutarlı olsa da, modern teorik gelişmeler karşısında önemli sınırlamalara sahiptir. Bu anlayış, Albert Einstein'ın genel görelilik teorisiyle radikal bir dönüşüme uğramıştır. Genel görelilikte, uzay ve zaman bağımsız mutlak varlıklar olmaktan çıkar ve kütle-enerji içeriği tarafından belirlenen ve dinamik olarak evrimleşen birleşik bir geometrik yapı haline gelir. Bununla birlikte, genel görelilik teorisi, süreklilik, yerellik ve türevlenebilirlik gibi klasik geometrik varsayımlara dayanmaya devam etmektedir. Bu varsayımlar hem kavramsal hem de teknik olarak, Planck ölçeğinde ciddi şekilde sorgulanmaktadır. Kara delik tekilliklerinin varlığı ve genel göreliliğin kuantum alan teorileriyle uzlaştırılamaması, uzay-zamanın

temel bir yapıdan ziyade daha derin bir mikrofiziksel bir kavram olabileceğini düşündürmektedir [3,6,14].

Bu noktada, özellikle yerellik varsayımını sorgulama açısından kuantum dolanıklığı merkezi bir rol oynamaktadır. Dolanık kuantum durumlarında, uzamsal ayırım ne kadar büyük olursa olsun, ölçüm sonuçları klasik olasılık teorisiyle açıklanamayan güçlü ve yapısal korelasyonlar oluşturur. Bu da, fiziksel etkileşimlerin yalnızca yerel neden-sonuç ilişkileriyle sınırlı olamayacağını ve ilişkisel bir yapının kuantum düzeyinde belirleyici olduğunu göstermektedir. Bu anlamda, dolanıklık, uzay-zamanın klasik yerel tanımını ile kuantum gerçekliği arasındaki gerilimi açıkça ortaya koymaktadır [2,5].

Bu açıdan bakıldığında, uzay-zamanın makroskopik geometrik tanımı, daha temel bir düzeyde var olan ve yerel parçalara indirgenemeyen kuantum ilişkisel yapılarının etkili bir sonucu olarak açıklanabilir. Burada dolanıklık, yalnızca ölçüm korelasyonlarını tanımlayan bir özellik değildir; uzamsal yakınlık, mesafe ve süreklilik gibi geometrik kavramların ortaya çıkışını belirleyen bir durum haline gelir. Bu yaklaşım, uzay-zamanın "verili" bir alan değil, dolanıklık modellerinin kolektif davranışından kaynaklanan aktif bir geometri olduğu fikrini desteklemektedir [2,5,12].

Kuantum Mekaniğinde Dolanıklığın Matematiksel Temelleri

Dolanıklığın matematiksel temeli, Hilbert uzayının tensör çarpımı yoluyla birleştirilmiş kuantum sistemlerinin tanımlanmasına dayanmaktadır. Bir durum vektörü, alt sistemlerinin durumlarının tek bir tensör çarpımı olarak ifade edilemiyorsa, dolanık olarak sınıflandırılır. Saf durumlar için, Schmidt ayrışımı dolanıklığın yapısını açık ve sistematik bir şekilde ortaya koyarken; karışık durumlar için, ayrılabilirlik kriterleri ve dolanıklık ölçüleri daha karmaşık bir matematiksel çerçeve gerektirir [5,6,22].

Dolanıklık entropisi, dolanıklığın nicel karakterizasyonunda önemli bir rol oynar. Ek olarak, eşzamanlılık, negatiflik ve sağlamlık gibi ölçüler, özellikle karışık durumlarda, dolanıklık derecesini belirlemede işlevsel araçlar sunar. Bu ölçüler, dolanıklığın dönüştürülebilir ve tüketilebilir bir kaynak olarak ele alınabileceğini gösteren termodinamik benzeri bir yapı ortaya koymaktadır [5,8,13].

Bu yaklaşım, uzay-zamanın bilgi kuramsal nicelikler aracılığıyla da tanımlanabileceği fikrine ortaya çıkarır. Geometri, dolanıklık örüntülerinin makroskopik bir ifadesi olarak kabul edilirse, metrik yapının mikroskobik kökeni kuantum bilgi akışları ve korelasyon yapıları aracılığıyla anlaşılabilir [1,7,9].

Ayrıca dolanıklığın matematiksel ve nicel analizi yalnızca kuantum durumlarını sınıflandırmakla kalmaz, aynı zamanda uzay-zamanın yeniden değerlendirilmesini de sağlar. [1–22].

Dolanıklık ve Uzay-Zaman Geometrisi

Dolanıklık-geometri ilişkisi, teorik fizikte uzay-zamanın ortaya çıkışını anlatan en iyi yaklaşımlardan biridir. Bu yaklaşımda, "yakınlık" ve "bağlantı" gibi kavramlar, klasik anlamda metrik mesafe ile değil, sistemler arasında paylaşılan kuantum korelasyonlarının yoğunluğu ve yapısı ile tanımlanır. Böylece, uzay-zaman komşuluğu önceden verilmiş bir geometrik özellik olmaktan çıkar ve dolanıklık ağının topolojisi ve korelasyon yoğunluğu tarafından belirlenen türevsel bir nicelik haline gelir. Bu bakış açısı, uzay-zamanın temelinde yerel noktalar yerine ilişkisel bilgi bağlantılarının yattığı fikrini güçlendirir [1–4,11].

Dolanıklık entropisinin holografik bir bağlamda geometrik yüzeylerle ilişkilendirilmesi, geometrinin bilgiye dayalı bir okumasını daha görünür hale getirmiştir. Bu bağlamda, uzay-zaman, mikroskobik düzeyde var olan kuantum derecelerinin dolanıklık modellerinin makroskobik tanımı olarak ortaya çıkar. Süreklilik ve düzgünlük gibi özellikler, ağ benzeri yapıların belirli ölçeklerde sergilediği ortalama davranışın bir sonucu olarak kabul edilebilir. Bu nedenle, uzay-zaman geometrisi temel bir varlık olarak değil, dolanıklık yapılarının kolektif etkisinden oluşan etkili bir düzey olarak yorumlanır [3,4,12]. Böylece, metrik yapı da doğrudan temel bir geometrik nicelik olmaktan çıkar. Metrik, dolanıklık yoğunluğunun ve korelasyon modellerinin uygun bir fonksiyonu olarak türetilen bir nicelik haline gelir. Azalan dolanıklık, zayıflayan geometrik bağlantılar ve uzay-zaman bütünlüğünün çözülmesiyle ilişkilendirilirken, artan dolanıklık uzay-zaman bağlantılarının güçlenmesi ve geometrinin daha iyi tanımlanmasıyla ilişkilidir. Bu nedenle, "geometri çözülmesi" kavramı, kuantum korelasyonlarının seyreltilmesiyle doğrudan bağlantılı olarak ele alınır [8,14–16].

Bu durumun fiziksel anlamı iki temel düzeyde değerlendirilebilir. Birinci düzeyde, süreklilik ve türevlenebilirlik gibi uzay-zamanın klasik özelliklerinin yalnızca belirli bir ölçek aralığında geçerli olan etkili nitelikler olduğu fikri ortaya çıkar. İkinci düzeyde, geometrik niceliklerin ölçümünün, altta yatan dolanıklık yapılarının dolaylı bir göstergesi olarak yorumlanabileceği fikri netleşir. Bu bağlamda, dolanıklık kriterleri yalnızca kuantum bilgi uygulamalarında değil, aynı zamanda geometrinin alternatif bir tanımlayıcısı olarak da fiziksel anlam kazanır [1,8,11].

Özellikle kara delik için, dolanıklık-geometri ilişkisi daha da kritik hale gelir. Kara delik ufuklarının entropik doğası, bilgi depolama kapasitesiyle ilgili sorunlar ve bu bilginin evrimi, dolanıklığın hem termodinamik hem de geometrik

rollerini görünür kılar. Ufuk alanı ile bilgi içeriği arasındaki ilişki, uzay-zaman geometrisinin kuantum bilgisiyle derinden iç içe geçtiğini gösterir ve dolanıklığın bilgi paradoksu gibi temel sorunların çözümünde kilit bir kavram olabileceğini öne sürer [14,15,17,18].

Kısacası, dolanıklık-geometri ilişkisi, uzay-zamanı temel bir arka plan olarak ele alan klasik yaklaşımların ötesine geçerek, geometrinin kuantum bilgi yapılarından türetilen bir düşünce olabileceği fikrini tutarlı ve fiziksel olarak anlamlı hale getirmiştir [1–18].

Kuantum Termodinamiğinde Entropi ve Dolanıklık

Dolanıklık ve termodinamik arasındaki ilişki, kuantum entropisinin klasik entropi kavramından niteliksel olarak farklılaştığı yerde belirginleşir. Klasik bilgi teorisinde entropi her zaman belirsizliği tanımlanırken, kuantum bağlamında koşullu entropinin negatif değerler alabilmesi, dolanıklığın klasik bilgi çerçevesinin ötesinde fiziksel bir kaynak olduğunu açıkça ortaya koymaktadır. Negatif koşullu entropi, birleşik sistemin tamamı aracılığıyla erişilebilen ve yerel tanımlamalarla elde edilemeyen bir alt sistemin durumunu temsil eder. Bu özellik, dolanıklığın yalnızca korelasyon değil, aynı zamanda fiziksel olarak "yararlı düzen" içerdiğini de göstermektedir [5-8].

Bu bağlamda, dolanıklık, klasik termodinamikteki düzen-düzensizlik ayırımına benzer şekilde, yerel düzeyde görünmez ancak küresel ölçekte erişilebilir bir kaynak olarak yorumlanabilir. Durum yerel alt sistemler açısından oldukça entropik ve düzensiz görünse bile, bu yapı belirli süreçler aracılığıyla birleşik sistem düzeyinde işlevsel bir kaynağa dönüştürülebilir. Bu, dolanıklığın klasik entropi kavramından farklı olduğunu ve kuantum mekaniğine özgü bir "ilişkisel düzen" biçimi sunduğunu ortaya koymaktadır. Dolanıklık damıtma süreçleri, belirli fiziksel kısıtlamalar altında daha az sayıda ancak daha yüksek saflıkta dolanık durum elde etmeyi amaçlamaktadır. Bu süreçler, termodinamikteki iş üretimi, verimlilik ve geri dönüşümsüzlük kavramlarıyla ilişkilendirilir. Benzer şekilde, yalnızca yerel süreçler ve klasik iletişim kullanılarak dolanıklığın artırılabilmesi, kuantum bilgi bağlamında da ikinci yasa benzeri bir kısıtlamanın geçerli olduğunu düşündürmektedir. Bunun aksine, çevreyle etkileşimden kaynaklanan bilgi kaybı ve entropik artışın yanı sıra dolanıklığın zayıflaması ve dağılması olarak açıklanabilir [5,6].

Bu termodinamik benzetmeler, uzay-zaman ve yerçekiminin fiziksel yorumuna uygulandığında daha da derin anlamlar taşır. Yerçekimi alan denklemlerinin termodinamik denge koşulları veya entropik değişiklikler yoluyla yeniden türetilmesi, geometrinin mikroskobik kökeninin istatistiksel ve bilgi tabanlı süreçlere dayanabileceği fikrini güçlendirmiştir. Bu durumda, entropi sadece mikroskobik durumların sayısını ifade eden bir nicelik olarak değil, uzay-

zamanın makroskobik yapısını belirleyen bir düzenleyici olarak ortaya çıkabilir [9,10].

Bu yaklaşımın daha da genişletilmiş hali, entropik yerçekiminde ortaya çıkmaktadır. Bu tür yaklaşımlarda, kuvvet kavramı temel bir etkileşim olarak değil, bilgi içeriğindeki değişikliklerden kaynaklanan aktif bir durum olarak açıklanabilir. Madde dağılımıyla ilgili bilgi içeriği değiştikçe, sistemin entropik durumu da değişir ve bu değişim makroskopik ölçekte bir “entropik dürtü” olarak okunabilir. Böylece, yerçekimi bilgi gradyanlarının geometrik bir yansıması haline gelebilir. Bu durumda, dolanıklık-geometri ilişkisi doğrudan bir termodinamik karşılık kazanabilir [10,11].

Bu kavramsal çerçeve içinde, kara delik termodinamiği, dolanıklık-termodinamik ilişkisinin test edildiği en kritik fiziksel bağlamlardan birini oluşturmaktadır. Kara delik ufuklarının entropi, sıcaklık ve radyasyon gibi termodinamik değişkenlerle karakterize edilebilmesi, geometrik nesnelerin klasik anlamda termodinamik sistemler gibi davranabileceğini göstermektedir. Ufuk entropisinin alanla orantılı olması, dolanıklığın mikroskobik kökenine işaret ederken; radyasyon süreçleri, bilgi akışı ve geri dönüşümsüzlük kavramlarını doğrudan uzay-zaman geometrisine bağlamaktadır[14,17,18].

Dolanıklık ve termodinamik arasındaki ilişki, kuantum bilgi teorisi ve uzay-zaman fiziği arasında kurulan en derin ve en güçlü bağlantılardan birini oluşturmaktadır. Entropi kavramı sadece bilgi eksikliğini değil, aynı zamanda geometri, yerçekimi ve nedensel yapının ortaya çıkaran temel bir ilkeyi de temsil etmektedir. Bu nedenle, dolanıklık, termodinamik aracılığıyla hem kuantum mekaniğinin hem de uzay-zamanın mikroskobik kökenlerini fiziksel olarak açıklayabilmektedir [5–18].

Kuantum Yerçekiminde Zaman ve Dolanıklık

Kuantum yerçekiminin amacı, uzay-zamanın mikroskobik yapısını kuantum mekaniğinin temel prensipleriyle tutarlı bir şekilde tanımlamaktır. Bu bağlamda, dolanıklığı temel bir yapı taşı olarak ele almak, yerçekiminin doğrudan geometrik bir etkileşim olarak değil, daha derinlerde yatan kuantum bilgi ağlarının etkili ve makroskobik bir tanımı olarak yorumlanmasına imkan tanır. Bu nedenle, yerçekimi geometrik eğrilikle değil, bilgi akışının ve dolanıklık modellerinin organize edilme biçimiyle ilişkilidir [3,9,13].

Bu yaklaşımın en çarpıcı sonuçlarından biri, zaman kavramının fiziksel durumunun yeniden değerlendirilmesidir. Klasik fizikte zaman, dinamiklerin dış etkenler ve evrensel bir parametresi olarak kabul edilirken; kuantum kozmolojisinde ve bilgi tabanlı yaklaşımlarda zaman, sistemler arası korelasyonlardan türetilen etkili bir nicelik olarak ele alınmaktadır. Bu çerçevede, zamansal akışın temel denklemlerde önceden tanımlanmış bir değişken olması

gerekmeyebilir. Bunun yerine, dolanıklık desenlerinin yeniden düzenlenmesi ve bilgi içeriğinin evrimi, zamanın fiziksel karşılığı olarak yorumlanabilir. Böylece zaman, mutlak bir arka plan değil, kuantum korelasyonlarının dinamik bir göstergesi haline gelmiş olur [15,16].

Zaman türetme fikri, ölçüm problemi ve gözlemcinin yeni bir çerçevedeki rolü gibi temel kavramsal sorunları ele almayı gerektirir. Zaman, alt sistemler arasındaki korelasyonların düzenli artışı veya azalışı yoluyla tanımlanırsa, "saat" kavramı mutlak bir dış referans olmaktan çıkar. Bunun yerine, birleşik bir kuantum sistemi içindeki seçilmiş alt sistemlerin istatistiksel davranışı, zamanın dinamik ölçüleri olarak işlev görebilir. Bu bakış açısıyla, görünüşte durağan kuantum durumları bile korelasyon yapılarındaki içsel değişiklikler yoluyla anlamlı bir hale gelebilir. Böylece, başlangıçta "dinamik olmadan dinamik" görünen durumlar, korelasyona dayalı bir zaman anlayışıyla tutarlı bir şekilde yeniden açıklanabilir [16,22].

Tekillik problemi de bu bilgi tabanlı çerçevede farklı bir anlam kazanmıştır. Klasik genel görelilikte tekillikler, geometrinin bozulduğu ve fiziksel yasaların geçerliliğini kaybettiği noktalar olarak kabul edilirken; dolanıklık merkezli yaklaşımlarda bu durum, bilgi ağının klasik süreklilik varsayımlarına dayalı bir geometri üretme kapasitesinin sınırına ulaşması olarak açıklanabilir. Bu bakış açısı, tekilliklerin kaçınılmaz olarak fiziksel tutarsızlıklar ürettiği varsayımı yerine, mevcut açıklama düzeyini aşan unsurlar olarak ele alınmasına imkan sağlar. Benzer şekilde, kara delik bilgi paradoksu bağlamında, bilgi akışının olay ufku etrafındaki dolanıklık yapılarının yeniden düzenlenmesi yoluyla tutarlı ve birleşik bir çerçeve içinde anlaşılabilmesi öne sürülmektedir [14,15].

Son olarak, hesaplamanın fiziksel sınırları da doğrudan dolanıklık-yerçekimi ilişkisine bağlanır. Eğer bilgi fiziksel bir nicelik ise ve dolanıklık kuantum bilgi işlemenin temel kaynağı olarak kabul edilirse, uzay-zamanın ortaya çıkışı ile hesaplanabilirlik sınırları arasında derin bir ilişki var demektir. Bu durumda, kara deliklerin bilgi depolama kapasitesi, karmaşıklığın artışı ve bilgi işlemenin sınırları sadece hesaplama teorisinde değil, aynı zamanda uzay-zamanın mikroskobik yapısını anlamada da belirleyici hale gelmiştir [19]. Bu, kuantum yerçekimi teorilerinin sadece geometrik değil, aynı zamanda bilgi-teorik yapılar olarak da okunabileceğini güçlü bir şekilde göstermektedir. Dolayısıyla, dolanıklık merkezli kuantum yerçekimi yaklaşımları, uzay-zaman, zaman, nedensellik ve hesaplanabilirlik gibi kavramları ortak bir bilgi tabanlı çerçeve içinde bir araya getirebilir. Bu durum zaman korelasyonların düzenlenmesi olarak ve yerçekimini ise bilgi akışlarının etkili bir yansıması olarak ortaya çıkarabilir [3–22].

Kuantum Yerçekimi ve Dolanıklıkta Fiziksel Etkiler

Dolanıklığa dayalı uzay-zaman yaklaşımı, fiziksel gerçekliği yeniden açıklayarak, nesne merkezli bir tanımdan ilişkisel bir tanıma geçişi zorunlu kılmaktadır. Bu çerçevede, temel unsur, parçacıklar, alanlar veya uzay-zaman noktaları gibi tekil ve önceden tanımlanmış varlıklar değil, bu varlıkların birbirleriyle kurduğu dolanıklık, korelasyon ve bilgi paylaşımı yapılarıdır. Fiziksel özellikler artık sistemlerde içsel mutlak nitelikler olarak değil, sistemler arası ilişkilerin bağlama duyarlı sonuçları olarak görünmektedir. Bu bakış açısı, uzay-zamanın bağımsız bir arka plan değil de ilişkisel yapıların kolektif ve tutarlı bir düzenlemesinden türetilen aktif bir kavram olduğunu öne sürmektedir [14,16,20–23].

Bu dönüşümün ölçüm teorisi için de önemli etkileri vardır. Ölçüm çıktıları, gözlemciden bağımsız ve önceden belirlenmiş fiziksel niceliklerin doğrudan açıklamaları olarak görülmemektedir; Ölçüm, ölçülen sistem, ölçüm cihazı ve çevre arasındaki dolanıklık yapılarının yeniden düzenlenmesi olarak açıklanmaktadır. Bu bağlamda, ölçüm tekil ve izole bir olaydan ziyade ilişkisel bir süreçtir ve ortaya çıkan fiziksel gerçeklik bu sürecin bağlamsal bir ürünü haline gelmiştir. Böylece, kuantum mekaniğinde uzun zamandır tartışılan ölçüm problemi, daha tutarlı bir biçimde yorumlanabilir [16,20].

Aynı ilişkisel bakış açısı, uzay-zamanın kökeni hakkındaki tartışmalarda da belirleyici bir rol oynayabilir. Geometrik yapı, dolanıklık ağlarının yoğunluğu, topolojisi ve dinamik yeniden düzenlemeleri tarafından belirleniyorsa, uzay-zaman nicelikleri temel unsurlar olmaktan çıkar ve türetilmiş tanımlayıcı araçlar haline gelebilir. Mesafe, yakınlık ve süreklilik gibi kavramlar, bu çerçevede sistemler arasındaki korelasyon derecelerinin makroskopik yansımaları olarak yeniden açıklanabilir. Bu, uzayın klasik anlayışının, uzay-zamanın bilgi ve ilişkisel bir anlayışıyla değiştirildiğini göstermektedir [14, 21–23].

Uzay-zamana dolanıklık temelli yaklaşım, fiziğin temel sorularını—"orada ne var?" ve "orada nasıl var?"—nesneler aracılığıyla değil, ilişkiler aracılığıyla yeniden formüle etmektedir [14,16,20–23].

Sonuç ve Gelecek Perspektifleri

Bu bölümde, kuantum dolanıklığı, uzay-zamanın fiziksel kökenine inilerek açıklanmıştır. Dolanıklığın matematiksel yapısı, geometrik kavramlarla olan derin ilişkisi ve termodinamik bağlamındaki karşılıkları dikkate alınarak, uzay-zamanın temel ve önceden belirlenmiş bir arka plan olmaktan ziyade, kuantum bilgi yapılarının kolektif ve ilişkisel özelliklerinden türetilen bir durum olduğu gösterilmiştir. Bu yaklaşım, uzay-zaman geometrisinin kuantum korelasyonlarının etkili bir açıklaması olarak yeniden yorumlanmasına olanak

tanır ve kuantum yerçekimi problemine bilgi tabanlı bir bakış açısı sağlamaktadır [1–24].

Gelecekte, dolanıklığın nicel ölçümü için deneysel tekniklerin geliştirilmesi ve çok parçacıklı kuantum sistemlerinde dolanıklık modellerini daha yüksek hassasiyetle kontrol etme yeteneği, bu teorik çerçevenin test edilebilirliğini önemli ölçüde artıracaktır. Özellikle, kuantum simülasyon platformları, soğuk atom sistemleri ve kuantum optik düzenekleri aracılığıyla elde edilen veriler, bilgi tabanlı geometrik modellerle ilişkilendirildiğinde, dolanıklık-geometri ilişkisinin deneysel olarak test edilmesine imkan sağlayabilir. Bu bağlamda, dolanıklık merkezli uzay-zaman yaklaşımlarının, yalnızca kavramsal olarak değil, aynı zamanda gözlemsel ve deneysel olarak da değerlendirilebilecek bir fiziksel teoriye dönüşmesi beklenmektedir.

KAYNAKLAR

- [1] Van Raamsdonk, M. (2010). Building up spacetime with quantum entanglement. *General Relativity and Gravitation*, 42(10), 2323–2329.
- [2] Maldacena, J., & Susskind, L. (2013). Cool horizons for entangled black holes. *Fortschritte der Physik*, 61(9), 781–811.
- [3] Swingle, B. (2012). Entanglement renormalization and holography. *Physical Review D*, 86(6), 065007.
- [4] Ryu, S., & Takayanagi, T. (2006). Holographic derivation of entanglement entropy from the AdS/CFT correspondence. *Physical Review Letters*, 96(18), 181602.
- [5] Horodecki, M., Oppenheim, J., & Horodecki, R. (2002). Are the laws of entanglement theory thermodynamical? *Physical Review Letters*, 89(24), 240403.
- [6] Fedorov, A. K., Kiktenko, E. O., Khabarova, K. Y. E., & Kolachevsky, N. N. (2023). Quantum entanglement, teleportation, and randomness: Nobel Prize in Physics 2022. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 193(11), 1162–1172.
- [7] Vedral, V. (2014). Quantum entanglement. *Nature Physics*, 10(4), 256–258.
- [8] Nielsen, M. A., & Chuang, I. L. (2010). *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press.
- [9] Volovik, G. E. (2024). Thermodynamics of Einstein static Universe with boundary. *arXiv preprint arXiv:2410.10549*.
- [10] Padmanabhan, T. (2010). Thermodynamical aspects of gravity: New insights. *Reports on Progress in Physics*, 73(4), 046901.
- [11] Verlinde, E. (2011). On the origin of gravity and the laws of Newton. *Journal of High Energy Physics*, 2011(4), 29.
- [12] Bianchi, E., & Myers, R. C. (2014). On the architecture of spacetime geometry. *Classical and Quantum Gravity*, 31(21), 214002.
- [13] Oriti, D. (2014). Disappearance and emergence of spacetime in quantum gravity. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, 46, 186–199.
- [14] Harlow, D. (2016). Jerusalem lectures on black holes and quantum information. *Reviews of Modern Physics*, 88(1), 015002.
- [15] Almheiri, A., Marolf, D., Polchinski, J., & Sully, J. (2013). Black holes: Complementarity or firewalls? *Journal of High Energy Physics*, 2013(2), 62.

- [16] Vedral, V. (2023). Classical Evolution without Evolution. *Universe*, 9(9), 394.
- [17] Tsallis, C., & Cirto, L. J. (2013). Black hole thermodynamical entropy. *The European Physical Journal C*, 73(7), 2487.
- [18] Calmet, X., Hsu, S. D., & Sebastianutti, M. (2023). Quantum gravitational corrections to particle creation by black holes. *Physics Letters B*, 841, 137820.
- [19] Lloyd, S. (2000). Ultimate physical limits to computation. *Nature*, 406 (6799), 1047–1054.
- [20] Rovelli, C. (2004). *Quantum gravity*. Cambridge University Press.
- [21] Smolin, L. (2006). The case for background independence. In D. Rickles, S. French, & J. Saatsi (Eds.), *The structural foundations of quantum gravity* 196–239. Oxford University Press.
- [22] Gudder, S. (2019). A theory of entanglement. *ArXiv:1904.06589*.
- [23] Braunstein, S. L., & Van Loock, P. (2005). Quantum information with continuous variables. *Reviews of Modern Physics*, 77(2), 513–577.
- [24] Galante, D. A. (2023). Modave lectures on de Sitter space & holography (No. arXiv: 2306.10141, p. 003).



BÖLÜM 3

Bose-Hubbard Modelinde Geliştirilmiş Gradyan Hesabı: Kısıtlı Boltzmann Makineleri İçin Yeni Bir Yaklaşım

Ülfet Atav¹ & Çağrı Kemal Erdal² & Ali Tambuğa³

1. Giriş

Kuantum çok-parçacık sistemleri, temel fizik ve malzeme bilimlerinden kuantum teknolojilerine kadar geniş bir alanda merkezi öneme sahiptir. Bu sistemlerin davranışlarını anlamak ve simüle etmek, teorik ve deneysel fiziğin en zorlu problemlerinden biridir. Temel zorluk, Hilbert uzayının sistemdeki parçacık sayısı ile üstel olarak büyümesinden kaynaklanır, bu da geleneksel hesaplama yöntemlerinin hızla uygulanamaz hale gelmesine yol açar (Carleo & Troyer, 2017) ; (McBrien, Carleo, Conference, & 2019).

Bose-Hubbard modeli, soğuk atom sistemlerinde ve optik kafeslerde bozon hareketini tanımlayan, kuantum çok-parçacık sistemlerinin en temel modellerinden biridir (Fisher, Weichman, Grinstein, & Fisher, 1989) . Model, süperakışkan (SF) ve Mott yalıtkanı (MI) gibi farklı fazları ve aralarındaki geçişleri tanımlaması açısından fiziksel olarak zengin ve teorik açıdan ilgi çekicidir. Fisher ve arkadaşları (Fisher vd., 1989) tarafından detaylı bir şekilde incelenen bu model, son yıllarda kuantum simülasyon çalışmaları için de önemli bir odak noktası haline gelmiştir.

Geleneksel olarak, Bose-Hubbard modelini çözmek için Kuantum Monte Carlo (QMC) (Batrouni, Scalettar, & Zimanyi, 1990) , Yoğunluk Matris Renormalizasyon Grubu (DMRG) (Satoshi Ejima vd., 2012) veya Tam Diyagonalizasyon gibi yöntemler kullanılmıştır. Ancak bu yöntemler, ya hesaplama karmaşıklığı ya da işaret problemi gibi sınırlamalarla karşı karşıyadır.

Son yıllarda, makine öğrenmesi teknikleri kuantum sistemlerin simülasyonunda devrim yaratmıştır. Özellikle, Carleo ve Troyer'in (Carleo & Troyer, 2017) çığır açan çalışmasında tanıtılan, yapay sinir ağlarını kuantum dalga fonksiyonlarını temsil etmek için kullanma yaklaşımı büyük ilgi görmüştür. Bu yaklaşımda, kısıtlı Boltzmann makineleri (RBM) gibi yapay sinir ağları, kuantum durumlarını temsil eden varyasyonel ansatz olarak kullanılmaktadır. Bu yöntem, hem spin sistemleri (Carleo & Troyer, 2017); (Deng, Li, & Das Sarma,

¹ Prof. Dr., Selçuk Üniversitesi, 0000-0002-2367-6666

² Dr., Orcid: 0009-0004-9894-492X

³ Orcid: 0009-0003-5740-3759

2017) hem de bozonik sistemler (McBrian vd.); (Japan & 2017, 2017) için başarıyla uygulanmıştır.

McBrian ve arkadaşları (McBrian vd.), Carleo ve Troyer'in yaklaşımını bir boyutlu Bose-Hubbard modeline adapte ederek, NetKet (McBrian vd.) platformu üzerinden RBM'leri eğitmiş ve modelin faz diyagramını ortaya çıkarmışlardır. Bu çalışma, RBM'lerin bozonik sistemlerin taban durumlarını temsil etmedeki potansiyelini göstermiştir.

Bununla birlikte, RBM yaklaşımının Bose-Hubbard modelindeki performansı, özellikle düşük kimyasal potansiyel (μ) değerlerinde görülen süperakışkan faz için tam olarak optimize edilmemiştir. Bu çalışmada, McBrian ve arkadaşlarının (McBrian vd.) çalışmasını temel alarak, Bose-Hubbard modelinin RBM ile simülasyonunda kullanılan ağırlık güncelleme algoritmasının geliştirilmiş bir versiyonunu sunuyoruz.

Yaklaşımımız, özellikle düşük μ değerlerinde gradyan hesaplamalarında ve karmaşık değerli RBM parametrelerinin güncellenmesinde optimize edilmiş bir strateji kullanmaktadır.

Bu makalede, geliştirdiğimiz ağırlık güncelleme stratejisinin detaylarını sunuyor ve bunun bir boyutlu Bose-Hubbard modelinin farklı parametrik rejimlerdeki performansını değerlendiriyoruz. Sonuçlarımız, özellikle düşük μ değerlerinde ortalama parçacık sayısı hesaplamasında önemli iyileştirmeler göstermekte ve daha önce McBrian ve arkadaşları (McBrian vd.) tarafından elde edilen faz diyagramı ile niteliksel uyum sağlamaktadır.

2. Teorik Altyapı

2.1. Bose-Hubbard Modeli

Bose-Hubbard modeli, optik kafeslerdeki ultra-soğuk bozonların kuantum dinamiklerini tanımlayan temel bir modeldir. Hamiltonian şu şekilde ifade edilir:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \sum_i \mu_i \hat{n}_i \quad (1)$$

Burada $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$ sırasıyla yaratma ve yok etme operatörleridir, $\langle ij \rangle$ en yakın komşu çiftlerini, $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ parçacık sayısı operatörünü, t atlama (hopping) parametresini, U yerinde (on-site) etkileşim kuvvetini ve μ kimyasal potansiyeli gösterir.

Model iki önemli parametre ile karakterize edilir: t/U ve μ/U . Bu parametrelerin değerlerine bağlı olarak, sistem iki farklı faz sergiler: Mott

yalıtkanı (MI) ve süperakışkan (SF). MI fazı, her kafeste tam sayıda parçacık bulunması ile karakterize edilir ve parçacık sayısı dalgalanmaları bastırılmıştır. SF fazında ise parçacıklar kafes boyunca delokalize olur ve sistem uzun menzilli faz düzeni gösterir.

Bir boyutlu sistemlerde, MI ve SF fazları arasındaki geçiş Kosterlitz-Thouless tipi bir faz geçiştir ve t/U 'nun kritik değeri yaklaşık 0.3'tür (Fisher vd., 1989). MI fazları, faz diyagramında Mott lobları olarak bilinen bölgelerde bulunur ve tamsayı yoğunluklar ile karakterize edilir ($\rho = 1, 2, 3, \dots$).

2.2. Kısıtlı Boltzmann Makineleri ve Kuantum Dalga Fonksiyonu Temsili

Kısıtlı Boltzmann Makinesi (RBM), bir görünür (visible) ve bir gizli (hidden) katmandan oluşan iki katmanlı bir yapay sinir ağıdır. Katmanlar arasında tam bağlantı vardır, ancak aynı katman içindeki nöronlar arasında bağlantı yoktur.

Carleo ve Troyer (Carleo & Troyer, 2017), RBM'leri kuantum çok-parçacık sistemlerinin dalga fonksiyonlarını temsil etmek için kullanmanın mümkün olduğunu göstermiştir. Bose-Hubbard modeli için, kuantum durum vektörü Fock bazında şu şekilde yazılabilir:

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle \quad (2)$$

Burada $|n\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle$ Fock durumlarını ve ψ_n karşılık gelen genlik katsayılarını gösterir. RBM kullanarak, bu dalga fonksiyonu katsayıları şu şekilde parametrize edilir:

$$\ln \psi(s) = \alpha^T \sigma + \sum_j \ln (\cosh \beta_j + W_j^T \sigma) \quad (3)$$

Burada α görünür katman nöronlarını, β_j ve W_j sırasıyla gizli katman nöronlarını ve bu iki katman arasındaki ağırlık katsayı matrisini gösterir. σ ise Bose-Hubbard modelinde her bir Fock durumunu one-hot encoding uygulanarak görünür nöronların aktif edildiği katmanı gösterir.

2.3. Varyasyonel Monte Karlo Yöntemleri

Varyasyonel Monte Carlo (VMC), kuantum sistemlerin taban durumlarını bulmak için kullanılan güçlü bir tekniktir. VMC, Varyasyonel prensip ile Monte Carlo örneklemesini birleştirir. Varyasyonel prensibe göre, herhangi bir

normalize edilmiş dalga fonksiyonu $|\psi\rangle$ için enerji beklenen değeri, taban durumu enerjisinden her zaman büyük veya ona eşittir:

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (4)$$

RBM ile parametrize edilmiş bir dalga fonksiyonu için, enerji şu şekilde hesaplanır:

$$E = \frac{\sum_n |\psi_n|^2 E_{loc}(n)}{\sum_n |\psi_n|^2} \quad (5)$$

Burada $E_{loc}(n) = \sum_{n'} \frac{\langle n | \hat{H} | n' \rangle \psi_{n'}}{\psi_n}$ yerel enerjidir. Bu toplam, özellikle çok sayıda serbestlik derecesi içeren sistemlerde doğrudan hesaplanamaz.

Bu nedenle, Monte Carlo örnekleme kullanılarak $|\psi_n|^2$ olasılık dağılımına göre durum uzayı örneklenir ve enerji beklenen değeri hesaplanır.

VMC'nin amacı, dalga fonksiyonu parametrelerini (α, β, W) enerjii minimize edecek şekilde optimize etmektir. Bu, stokastik gradyan iniş (SGD) algoritmaları kullanılarak gerçekleştirilir.

Enerji gradyanı şu şekilde hesaplanır:

$$\nabla_\theta E = 2Re[\langle E_{loc} \nabla_\theta \ln \psi \rangle - \langle E_{loc} \rangle \langle \nabla_\theta \ln \psi \rangle] \quad (6)$$

Burada θ , RBM parametrelerini temsil eder.

2.4. Metropolis-Hastings Algoritması ve Kuantum Sistemleri İçin Uygulamaları

Metropolis-Hastings algoritması, belirli bir olasılık dağılımına göre örnekleme yapmak için kullanılan bir Markov Zinciri Monte Carlo (MCMC) yöntemidir. VMC bağlamında, $|\psi_n|^2$ olasılık dağılımına göre Fock durumlarını örnekleme için kullanılır.

Algoritma şu adımları izler:

Başlangıç durumu n seçilir.

Bir sonraki durumu önermek için bir geçiş olasılığı $P(n \rightarrow n')$ kullanılır.

Önerilen durum n' için kabul olasılığı hesaplanır:

$$A(n \rightarrow n') = \min \left(1, \frac{|\psi_{n'}|^2}{|\psi_n|^2} \right) \quad (7)$$

Rastgele bir sayı $r \in [0,1]$ üretilir. Eğer $r < A(n \rightarrow n')$ ise, önerilen durum kabul edilir; aksi takdirde mevcut durumda kalınır.

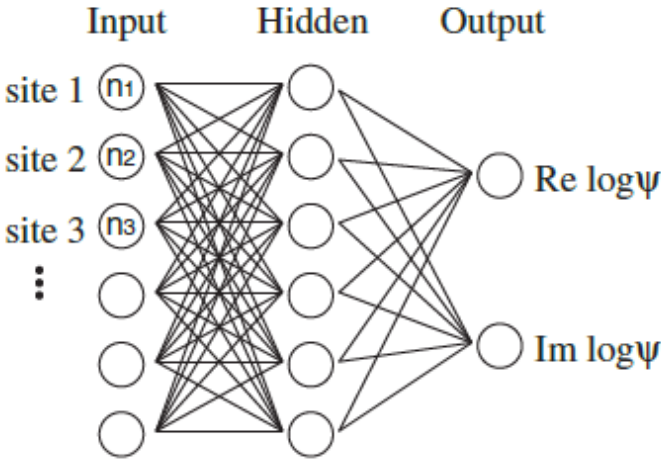
Bu işlem yeterince tekrarlanarak bir durum uzayı örnekleme oluşturulur.

Bose-Hubbard modeli için, geçiş olasılığı genellikle yerel parçacık hareketlerine dayanır. Geleneksel yaklaşımda, bir kafesteki parçacık sayısı bir artırılır veya azaltılır.

3. Metodoloji

3.1. RBM Mimarisi ve Parametre Başlatma

Bu çalışmada kullanılan Kısıtlı Boltzmann Makinesi (RBM) mimarisi, Bose-Hubbard modelinin kuantum durumlarını temsil etmek üzere özel olarak tasarlanmıştır. RBM, bir görünür katman ve bir gizli katmandan oluşan iki katmanlı bir yapay sinir ağıdır ve **Şekil 1** de gösterilmiştir.



Şekil 1. Bose-Hubbard modelini çözmek için kullanılan yapay sinir ağının şematik diyagramı. (Japan & 2017, 2017)

Sistemimizde, $L = 6$ kafesli bir boyutlu bir zincir ve her kafeste maksimum $n_{\max} = 5$ parçacık olacak şekilde bir konfigürasyon kullanılmıştır. Görünür katman, her bir kafes bölgesi için $n_{\max} + 1$ adet nöronla temsil edilir. Bu, one-hot encoding yaklaşımıyla her kafes için olası parçacık sayılarını $(0, 1, 2, \dots, n_{\max})$

kodlar. Böylece, görünür katmanda toplam $n_{in} = L \times (n_{max} + 1) = 6 \times 6 = 36$ nöron bulunmaktadır.

Gizli katmanda $n_{hidden} = 32$ nöron kullanılmıştır. Bu değer, sistemin karmaşıklığını yeterince yakalayabilecek, ancak aşırı parametrelendirmeyi önleyecek şekilde seçilmiştir.

RBM parametreleri (α , β , W) karmaşık değerlerle başlatılır. Başlangıç değeri olarak hem gerçek hem de sanal kısım 0-0.1 aralığı olarak belirlenmiştir.

Burada α görünür katman bias değerlerini, β gizli katman bias değerlerini ve W ağırlık matrisini gösterir.

3.2. Dalga Fonksiyonu Hesaplaması

Dalga fonksiyonu, bir kuantum durumunun RBM ile parametrize edilmiş olasılık genlikleridir. Sistemimizde, logaritmik dalga fonksiyonu $\ln \psi(s)$ denklem (3)'te olduğu gibi belirlenmektedir.

3.3. Enerji Hesabı

Sistemin enerjisi, Bose-Hubbard Hamiltonianının beklenen değeri olarak hesaplanır. Yerel enerji yaklaşımı kullanılarak, her bir durum için enerji katkısı şu şekilde hesaplanır:

$$E(s) = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{\psi(s')}{\psi(s)} \sqrt{(n_j)(n_i + 1)} + \sum_i n_i \left(\frac{U}{2} (n_i - 1) - \mu \right) \quad (8)$$

Burada $\langle i,j \rangle$ en yakın komşu çiftlerini, s' parçacık hareketinden sonraki durumu, n_i , i 'nci kafesteki parçacık sayısını, t atlama parametresini, U yerinde etkileşim kuvvetini ve μ kimyasal potansiyeli temsil eder.

Kodda, enerji hesaplaması her bir kafes için parçacık hareketlerini dikkate alarak yapılır. Sağ ve sol komşulara parçacık hareketlerinin katkıları hesaplanır ve toplam enerji elde edilir.

3.4. Gradyan Hesaplama ve Parametre Optimizasyonu

RBM parametrelerinin optimizasyonu, stokastik gradyan iniş (SGD) yöntemiyle gerçekleştirilir.

Enerji fonksiyonunun gradyanı şu şekilde hesaplanır:

Karmaşık değerli parametreler için, gerçel ve sanal kısımlar ayrı ayrı hesaplanır ve RBM parametreleri her adımda güncellenir.

$$e^{-\beta \Delta E} = \frac{|\psi(s')|^2}{|\psi(s)|^2} \quad (9)$$

$$-\beta \Delta E = |\ln \psi(s')^2 - \ln \psi(s)^2| = \Delta \phi = \vec{\nabla} \phi \cdot \Delta \vec{\omega} \quad (10)$$

$$\Delta \vec{\omega} = \alpha \vec{\nabla} \phi \quad (11)$$

$$-\beta \Delta E = (\vec{\nabla} \phi) \alpha \vec{\nabla} \phi \quad (12)$$

$$\alpha = \frac{-\beta \Delta E}{|\vec{\nabla} \phi|^2} \quad (13)$$

$$\Delta \vec{\omega} = \frac{-\beta \Delta E}{|\vec{\nabla} \phi|^2} \vec{\nabla} \phi \quad (14)$$

Burada β Boltzman faktörü olarak belirlenmiştir. $\Delta \vec{\omega}$ ise RBM katsayılarını(α, β ve w) temsil etmektedir. Hesaplamada etkin sıcaklık değeri artırılmıştır.

$$Boltzman = \frac{Energy_{diff}}{grad_{top}} \quad (15)$$

Gradyan büyüklüğü çok küçük olduğunda ($< 1e-5$), sayısal kararlılık için bir alt sınır uygulanır.

3.5. Eğitim

Rastgele bir başlangıç durumu (initial_state) oluşturulur ve toplam 2000 adımda örneklem boyunca (2000x100) eski ve yeni duruma ait dalga fonksiyonları hesaplanarak metropolis algoritmasından geçirilir. Her örneklemede elde RBM değerleri denklem (14) ile optimize edilerek güncellenir. Optimizasyon sürecinde sistemin etkin sıcaklık değeri adım sayısına bağlı olarak şu şekilde güncellenir:

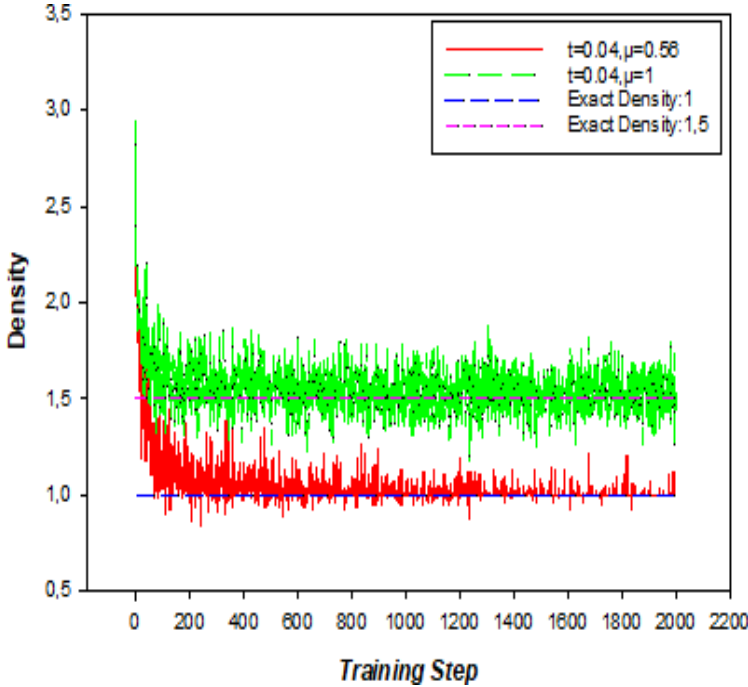
$$T(i) = T_{initial} \left(\frac{T_{final}}{T_{initial}} \right)^{\frac{i}{N_{total}}} \quad (16)$$

Burada $T(i)$ i'nci adımdaki sıcaklık, T_{initial} başlangıç etkin sıcaklığı (0.01), T_{final} bitiş etkin sıcaklığı (0.1), i mevcut sweep(adım) indeksi ve N_{total} toplam sweep sayısıdır. Bu şekilde faz uzayı daha yavaş ve daha derin taranmış olur. Her adımda elde edilen enerji ve yoğunluk değerleri hesaplanır. Örneklem ortalaması alınır ve bir sonraki adıma geçilir. Süreç sonunda son 100 adım ortalaması alınarak bir sonraki μ/U değerine karşılık t/U değeri için hesaplama yapılır.

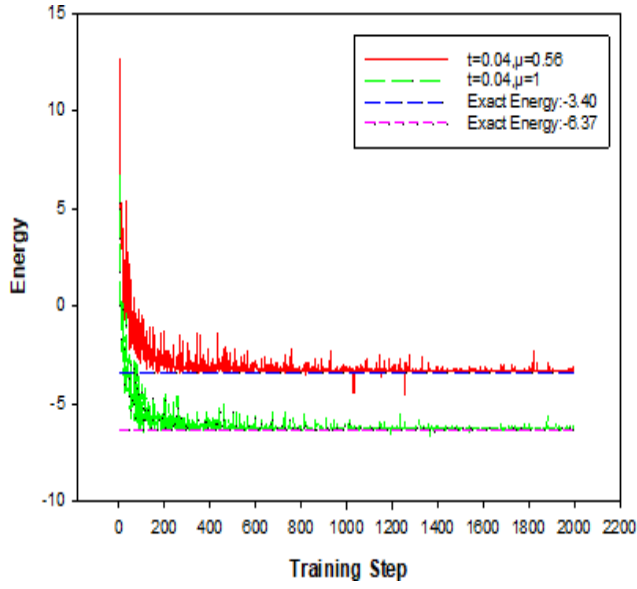
Eğitim sürecinde, enerji ve yoğunluk değerleri iterasyonlar boyunca takip edilir ve eğitimin yakınsama durumu değerlendirilir. Ayrıca, düşük ve yüksek μ değerlerindeki performans karşılaştırılarak metodolojinin etkinliği analiz edilir.

4. Sonuçlar

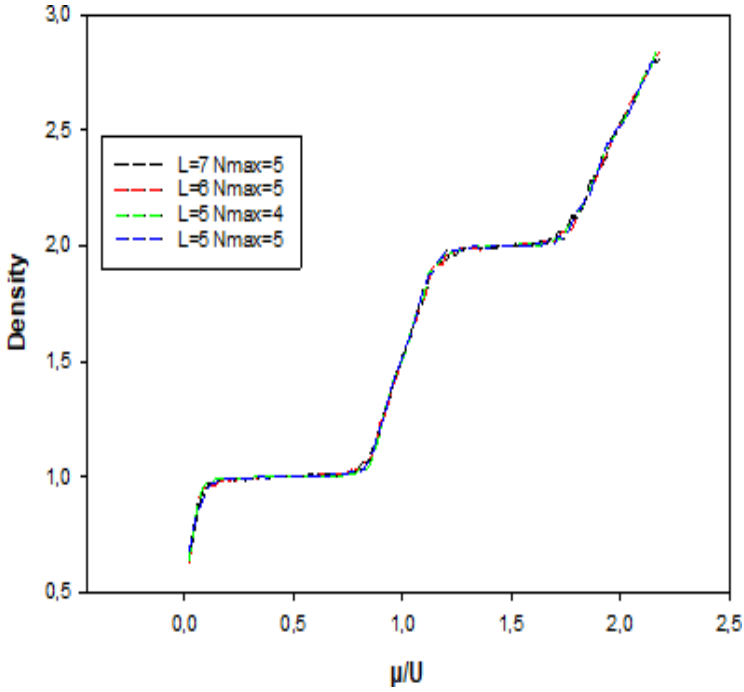
Geliştirdiğimiz yaklaşımın performansını değerlendirmek için, Bose-Hubbard modelini farklı parametre kombinasyonları için simüle ettik. Bazı sonuçlar grafiklerle şu şekilde sunulmuştur:



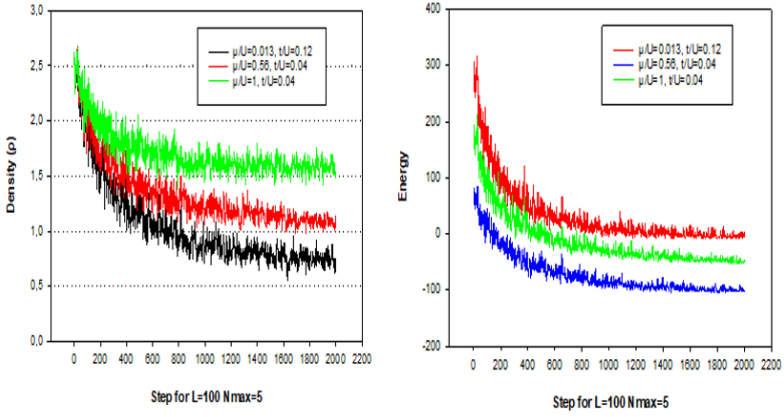
Şekil 2. Hesaplanan enerji ve yoğunluk değerinin exact hesaba çok hızlı yakınsadığı görülmüştür.



Şekil 3. Hesaplanan enerji ve yoğunluk değerinin exact hesaba çok hızlı yakınsadığı görülmüştür.

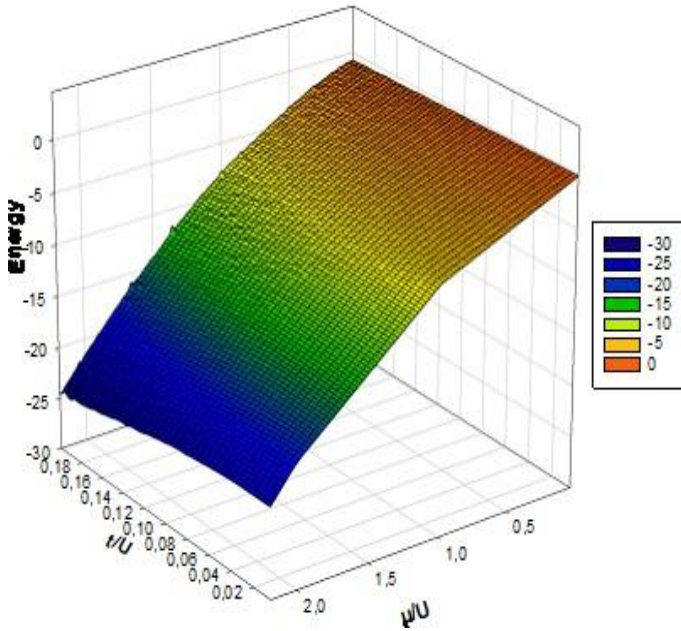


Şekil 4. Farklı parçacık ve latis sayısına göre yoğunluk değerlerinin uyumlu ve kararlı olduğu görülmüştür.

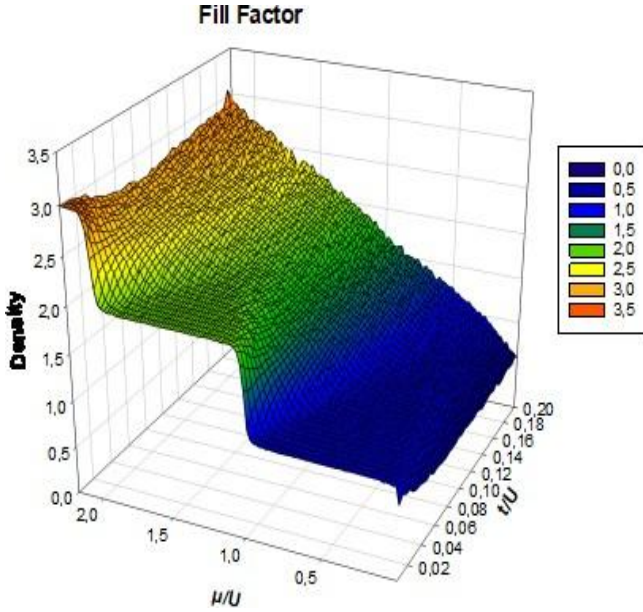


Şekil 5. Latis sayısının(L) 100 olduğu durumda Sol grafikte siyah, kırmızı ve yeşil çizgiler $L=6$ için hesaplanan yoğunluk değerleri $\rho = 0.66$, $\rho = 1$ ve $\rho = 1.5$ ile uyumlu olduğu görülmüştür. Sağ garfikte ise taban enerji durumuna yakınsadığı görülmüştür.

Energy Graph



Şekil 6. Farklı μ/U ve t/U değerleri için hesaplanan enerji değerlerinin düzgün ve kararlı yapısı görünmektedir.

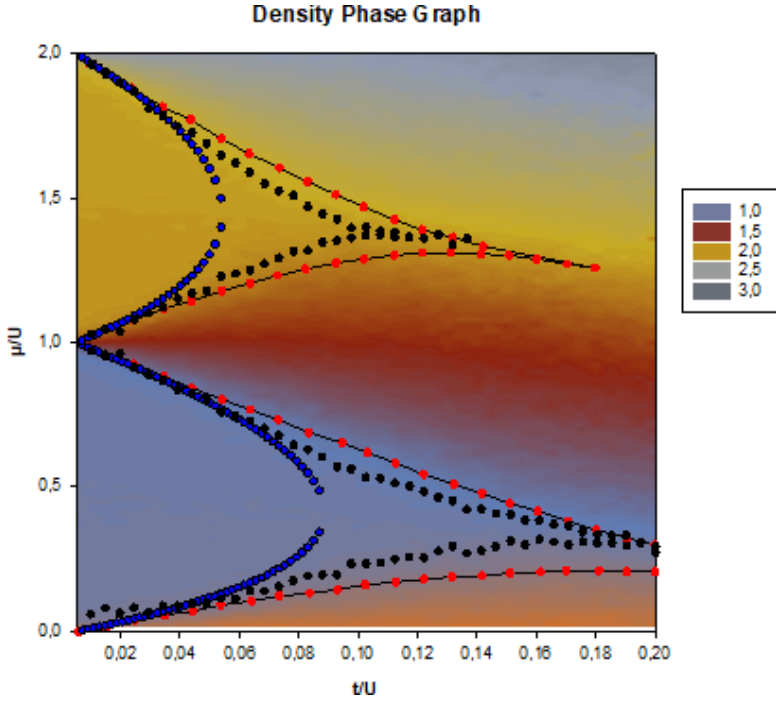


Şekil 7. Farklı μ/U ve t/U değerleri için hesaplanan yoğunluk değerlerinin mott bölgeleri($\rho = 1$, $\rho = 2$) ve süper akışkan bölgeleri açıkça görünmektedir.

4.1. Geleneksel Yöntemlerle Karşılaştırma

Geliştirdiğimiz yaklaşımın etkinliğini değerlendirmek için, sonuçlarımızı DMRG(S Ejima, Fehske, Letters, & 2011, 2011) ve denklem (17) ile elde edilen MFT(Mean Field Theory)(Lewenstein, Sanpera, & Ahufinger, 2012) sonuçları ile **Şekil 8** ve **Şekil 9**' da karşılaştırıyoruz

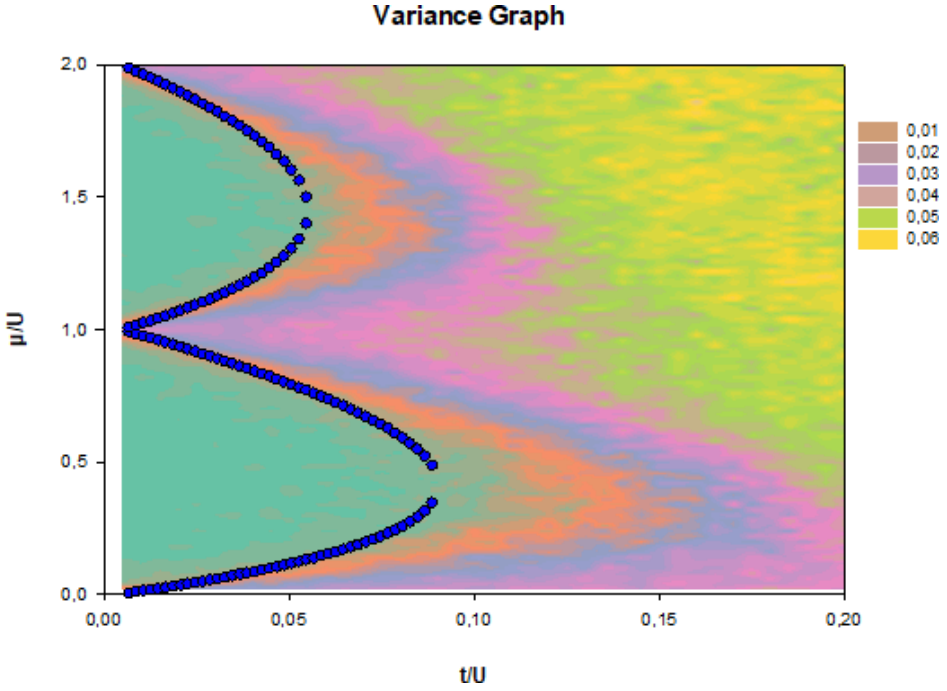
. **Şekil 8**'de mavi noktalar ile gösterilen MFT mott yalıtkan fazı bölgeleri aşağıdaki denklemde elde edilmiştir.



Şekil 8.Bose-Hubbard modelinin faz diyagramı.Yatay eksen t/U değeri ile μ/U değerine karşılık ortalama parçacık yoğunluğunu göstermektedir. mavi ve sarı bölgeler sırası $\rho = 1, \rho = 2$ için mott yalıtkan fazını diğer bölgeler süper akışkan fazı göstermektedir. Kırmızı noktalar DMRG faz geçiş sınırlarını mavi noktalar MFT yaklaşımı sınırlarını siyah noktalar hesapladığımız verilere ait faz geçiş sınırlarını göstermektedir.

$$\frac{t}{U} = - \frac{n(n-1) - \left(\frac{\mu}{U}\right)(2n-1) + \left(\frac{\mu}{U}\right)^2}{2z\left(1 + \frac{\mu}{U}\right)} \quad (17)$$

Burada z en yakın komşuluk için 2 ve n ortalama parçacık sayısı 1. mott lobu için 1 ve 2. Mott lobu için de 2 alınmıştır.



Şekil 9. Bose-Hubbard modelinin faz diyagramı. Yatay eksen t/U değerine karşı μ/U için ortalama varyans değerleri göstermektedir. Mavi noktalar MFT ile hesaplanan Mott yalıtkan(MI) fazı bölgeleri diğer bölgeler Super Fluid(SF) fazı bölgeleridir.

Sonuçlar, geliştirdiğimiz yaklaşımın McBrien ve arkadaşlarının(McBrien vd.) klasik RBM yaklaşımına göre daha düşük hata oranları sunduğunu ve daha hızlı ve kararlı yakınsadığı göstermektedir. Özellikle düşük t/U - μ/U değerlerinde, yaklaşımımız parçacık yoğunluğunu daha doğru hesaplamakta ve exact(tam hesaplama) sonuçlarına daha yakın değerler vermektedir.

Kaynaklar

- Batrouti, G. G., Scalettar, R. T., & Zimanyi, G. T. (1990). Quantum critical phenomena in one-dimensional Bose systems. *APSGG Batrouni, RT Scalettar, GT ZimanyiPhysical review letters*, 1990•APS, 65(14), 1765-1768. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.1765>
- Carleo, G., & Troyer, M. (2017). Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *science.orgG Carleo, M TroyerScience*, 2017•science.org, 355(6325), 602-606. <https://doi.org/10.1126/science.aag2302>
- Deng, D. L., Li, X., & Das Sarma, S. (2017). Quantum entanglement in neural network states. *APSDL Deng, X Li, S Das SarmaPhysical Review X*, 2017•APS, 7(2). <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.7.021021>
- Ejima, S, Fehske, H., Letters, F. G.-E., & 2011, undefined. (2011). Dynamic properties of the one-dimensional Bose-Hubbard model. *iopscience.iop.orgS Ejima, H Fehske, F GebhardEurophysics Letters*, 2011•iopscience.iop.org. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/93/30002/META>
- Ejima, Satoshi, Fehske, H., Gebhard, F., Zu Münster, K., Knap, M., Arrigoni, E., & Von Der Linden, W. (2012). Characterization of Mott-insulating and superfluid phases in the one-dimensional Bose-Hubbard model. *APSS Ejima, H Fehske, F Gebhard, K Zu Münster, M Knap, E Arrigoni, W Von Der LindenPhysical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 2012•APS, 85(5). <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.85.053644>
- Fisher, M. P. A., Weichman, P. B., Grinstein, G., & Fisher, D. S. (1989). Boson localization and the superfluid-insulator transition. *APSMFA Fisher, PB Weichman, G Grinstein, DS FisherPhysical Review B*, 1989•APS, 40(1), 546-570. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.546>
- Japan, H. S.-J. of the P. S. of, & 2017, undefined. (2017). Solving the Bose–Hubbard model with machine learning. *journals.jps.jpH SaitoJournal of the Physical Society of Japan*, 2017•journals.jps.jp, 86(9). <https://doi.org/10.7566/JPSJ.86.093001>
- Lewenstein, M., Sanpera, A., & Ahufinger, V. (2012). *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating quantum many-body systems*. Geliş tarihi gönderen [https://books.google.com/books?hl=tr&lr=&id=e4OiwSkmtQwC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Lewenstein,+M.,+Sanpera,+A.,+and+Ahufinger,+V.+\(2012\).+Ultracold+Atoms+in+Optical+Lattices:+Simula-ting+quantum+many-body+systems.+Oxford+University+Press+\(UK\).&ots=NI3QhTkSNf&sig=XMNlcaVYvlu3UYUrRSZ1n-wo8ZM](https://books.google.com/books?hl=tr&lr=&id=e4OiwSkmtQwC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Lewenstein,+M.,+Sanpera,+A.,+and+Ahufinger,+V.+(2012).+Ultracold+Atoms+in+Optical+Lattices:+Simula-ting+quantum+many-body+systems.+Oxford+University+Press+(UK).&ots=NI3QhTkSNf&sig=XMNlcaVYvlu3UYUrRSZ1n-wo8ZM)

McBrian, K., Carleo, G., Conference, E. K.-J. of P., & 2019, undefined. Ground state phase diagram of the one-dimensional Bose-Hubbard model from restricted Boltzmann machines. *iopscience.iop.org* K McBrian, G Carleo, E Khatami *Journal of Physics: Conference Series*, 2019•*iopscience.iop.org*. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1290/1/012005>



BÖLÜM 4

First-Principles Modeling of Defect-Based Solid-State Qubits in Wide Band Gap Materials

Aslı Öztürk Kiraz¹

1. Introduction

In recent years, solid-state quantum technologies have increasingly turned toward atomically localized defect states as practical and scalable qubit platforms. Early demonstrations of optically addressable spin centers in diamond revealed that isolated lattice defects can host remarkably stable quantum states under ambient conditions (Gruber et al., 1997; Doherty et al., 2013). Since then, defect-based qubits have emerged as a compelling alternative to extended electronic platforms such as topological surface states or superconducting condensates. Rather than relying on collective phases, these systems derive their quantum functionality from discrete electronic levels introduced by point defects within an otherwise insulating host lattice.

Such localized defect states can exhibit well-defined spin multiplicities, long coherence times, and optical initialization and readout capabilities—features that make them particularly attractive for quantum information processing and quantum sensing (Jelezko & Wrachtrup, 2006; Awschalom, Hanson, Wrachtrup, & Zhou, 2018). Wide band gap materials, including diamond, silicon carbide, and hexagonal boron nitride, have proven especially suitable as host systems. Their large band gaps provide electronic isolation that stabilizes in-gap defect states while minimizing coupling to thermally activated carriers (Weber et al., 2010; Tran et al., 2016).

Understanding the microscopic origin of these spin-active centers requires more than phenomenological models. It demands a detailed description of defect formation energetics, charge transition levels, symmetry-induced electronic splitting, and spin-dependent interactions such as zero-field splitting and hyperfine coupling. First-principles electronic structure methods have become indispensable in this context. Density functional theory and its beyond-DFT extensions enable quantitative predictions of defect levels, spin densities, and magnetic tensors, thereby linking atomic-scale structure to experimentally observable qubit behavior (Gali, 2009; Deák et al., 2014).

¹ Assoc. Prof. Dr., Department of Physics, Faculty of Science, Pamukkale University
ORCID: 0000- 0001- 9837-0779

This chapter examines the atomistic mechanisms that give rise to defect-based qubits and surveys the computational methodologies required to model their electronic, magnetic, and spin-dynamical properties with predictive accuracy.

2. Electronic Structure of Point Defects in Wide Band Gap Hosts

2.1 Vacancy and Divacancy States

Vacancies constitute the most elementary intrinsic defects in crystalline solids, yet their electronic consequences can be remarkably rich. When an atom is removed from a lattice site, the broken bonds reorganize and generate localized electronic states that often appear within the band gap of wide band gap hosts. Because the valence and conduction bands are energetically well separated in materials such as diamond and silicon carbide, these defect-induced levels remain spectrally isolated and can host well-defined spin configurations (Stoneham, 2001).

A prototypical example is the negatively charged nitrogen–vacancy (NV^-) center in diamond. Structurally, it consists of a substitutional nitrogen adjacent to a carbon vacancy, lowering the local symmetry from T_d to C_{3v} . The defect introduces symmetry-adapted a_1 and e orbitals within the gap. The occupation of these orbitals leads to a spin-triplet ground state ($S = 1$), whose fine structure is governed by spin–spin dipolar interactions (Doherty et al., 2013; Gali, 2009). The spatial localization of the defect wavefunction—primarily distributed over the three nearest carbon atoms and the nitrogen—underpins both its optical addressability and long coherence times.

In silicon carbide (SiC), divacancy centers arise from the removal of adjacent silicon and carbon atoms. Owing to the presence of inequivalent lattice sites and multiple polytypes (e.g., 4H-SiC, 6H-SiC), several symmetry-distinct divacancy configurations exist. These configurations exhibit different zero-phonon line energies and spin Hamiltonian parameters, reflecting subtle variations in local crystal field and strain (Weber et al., 2010; Koehl et al., 2011). Such sensitivity illustrates how even small structural perturbations can modulate the electronic and spin structure of defect qubits.

2.2 Substitutional Impurities

Substitutional impurities form when a foreign atom replaces a host atom in the lattice. Unlike vacancies, which primarily redistribute existing bonding electrons, substitutional defects introduce electronic states that reflect the impurity’s valence configuration and its interaction with the local crystal field.

The electronic character of these defects depends strongly on their charge state and on the Fermi level position within the host material. In wide band gap systems, donor-like impurities introduce levels close to the conduction band

minimum, whereas acceptor-like impurities generate states near the valence band maximum. The stability of a given charge state can be quantified through defect formation energies expressed as:

$$E_f(q) = E_{\text{defect}}(q) - E_{\text{bulk}} + \sum_i n_i \mu_i + q(E_F + E_v) + E_{\text{corr}},$$

where q is the defect charge, μ_i are chemical potentials, and E_{corr} accounts for finite-size electrostatic corrections (Freysoldt, Neugebauer, & Van de Walle, 2014).

Charge transition levels, defined by the Fermi-level position at which two charge states have equal formation energy, determine optical ionization thresholds and spin stability. In the context of qubit operation, maintaining a specific charge state—such as NV^- rather than NV^0 —is essential, since the spin multiplicity and optical selection rules differ substantially between charge configurations (Gali, 2009).

2.3 Symmetry Breaking and Defect-Induced Gap States

The symmetry of the host lattice and its reduction due to defect formation critically shape the electronic structure. In high-symmetry environments, defect orbitals may form degenerate representations. However, lattice relaxation, electron–electron interactions, and spin–orbit coupling can lift these degeneracies through symmetry breaking.

For example, the Jahn–Teller effect can stabilize lower-symmetry distortions when partially occupied degenerate states are present. Such distortions modify the electronic density distribution and can alter the splitting between defect levels. In wide band gap hosts, these symmetry-driven splittings define the separation between ground and excited states and therefore directly influence optical transition energies and spin sublevel structure (Stoneham, 2001).

Defect-induced gap states are typically characterized by their degree of localization, symmetry representation, and spin polarization. Their wavefunctions can be projected onto atomic orbitals to quantify the contribution of specific neighboring atoms. The spatial extent of these states determines their sensitivity to strain, electric fields, and nearby nuclear spins—parameters that ultimately govern decoherence pathways.

2.4 Supercell Modeling Considerations

First-principles modeling of point defects is typically performed within a periodic supercell framework. While this approach enables the use of plane-wave basis sets and efficient Brillouin zone sampling, it introduces artificial

interactions between periodically repeated defect images. Convergence with respect to supercell size is therefore mandatory to ensure that defect–defect coupling does not distort the electronic structure.

Charged defects present an additional challenge. The introduction of a net charge in a periodic system generates spurious long-range Coulomb interactions. Makov–Payne corrections provide an analytical scheme to reduce leading-order finite-size errors (Makov & Payne, 1995), while the Freysoldt–Neugebauer–Van de Walle (FNV) method offers a more robust, alignment-based correction procedure suitable for anisotropic materials (Freysoldt et al., 2009).

Another critical consideration concerns the exchange–correlation functional. Semilocal functionals such as PBE typically underestimate band gaps, which can lead to inaccurate placement of defect levels. Hybrid functionals, particularly HSE06, partially restore the band gap and yield more reliable defect transition energies, albeit at significantly higher computational cost (Heyd, Scuseria, & Ernzerhof, 2003; Deák et al., 2014). In systems where strong correlation effects are relevant, further beyond-DFT approaches may be required.

Accurate electronic structure modeling of defect qubits, therefore, demands not only a careful physical interpretation of defect states but also methodological rigor in supercell construction, charge correction schemes, and functional selection.

3. Spin Hamiltonian of Defect Qubits

Atomically localized defect qubits are ultimately governed by an effective spin Hamiltonian that captures the magnetic interactions shaping their fine structure. While electronic structure calculations reveal the underlying defect orbitals, it is the spin Hamiltonian formalism that connects these microscopic states to experimentally measurable quantities such as electron spin resonance (ESR) spectra and optically detected magnetic resonance (ODMR) transitions (Abragam & Bleaney, 1970).

In its general form, the spin Hamiltonian of a defect center can be written as:

$$\hat{H} = \mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{g} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{D} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{I}} + \dots$$

where the first term describes Zeeman interaction, the second term corresponds to zero-field splitting, and the third accounts for hyperfine coupling. Each of these contributions encodes a different aspect of the spin physics of defect qubits.

3.1 Zero-Field Splitting (D Tensor)

Zero-field splitting (ZFS) arises in systems with spin $S \geq 1$, where spin–spin dipolar interactions lift the degeneracy of magnetic sublevels even in the absence of an external magnetic field. For example, in the NV^- center in diamond, the

ground state is a spin triplet ($S = 1$). The dipolar interaction between the two unpaired electrons produces a splitting of approximately 2.87 GHz between the $m_s = 0$ and $m_s = \pm 1$ sublevels (Doherty et al., 2013).

The ZFS term is typically expressed as:

$$\hat{H}_{ZFS} = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{D} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

where $\mathbf{D}$ is a traceless, symmetric second-rank tensor. In high-symmetry systems such as C_{3v} , the tensor reduces to an axial form characterized by parameters D and E . The magnitude of D reflects the spatial distribution of spin density; more localized spin densities generally enhance dipolar interaction strength.

First-principles calculations of the D tensor rely on evaluating spin density distributions and computing the magnetic dipole–dipole interaction between electrons (Gali, 2009; Ivady et al., 2014). Because ZFS depends sensitively on wavefunction localization and symmetry, it serves as a stringent test of the accuracy of electronic structure methods.

3.2 Spin–Spin Dipolar Interaction

At a microscopic level, zero-field splitting originates from magnetic dipole–dipole interaction between electron spins. The interaction Hamiltonian can be written as

$$\hat{H}_{dd} = \frac{\mu_0 (g\mu_B)^2}{4\pi r^3} [\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 - 3(\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}})],$$

where r is the inter-electron distance. In extended systems, this interaction is averaged over the spatial spin density, leading to the effective D tensor.

What makes this interaction particularly relevant for defect qubits is its geometric sensitivity. Even subtle lattice distortions can modify the relative orientation and separation of spin density lobes, thereby shifting ZFS parameters. This explains why strain and electric fields can tune qubit resonance frequencies, a feature exploited in quantum sensing applications (Doherty et al., 2013).

3.3 Hyperfine Coupling Tensors

Hyperfine interaction describes the coupling between the electronic spin and nearby nuclear spins. It plays a dual role: on one hand, it introduces decoherence through interaction with a nuclear spin bath; on the other hand, it enables controlled nuclear-spin registers for quantum memory applications (Jelezko & Wrachtrup, 2006).

The hyperfine Hamiltonian is written as:

$$\hat{H}_{hf} = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{I}},$$

where $\mathbf{A}$ is the hyperfine tensor and $\hat{\mathbf{I}}$ is the nuclear spin operator. The tensor contains two contributions:

1. Fermi contact interaction — proportional to spin density at the nucleus.
2. Dipolar interaction — dependent on the spatial distribution of spin density.

First-principles calculations extract hyperfine tensors directly from the spin-polarized electronic structure (Gali, 2009). Agreement between calculated and experimentally measured hyperfine constants provides strong validation of the defect wavefunction description. In diamond, for instance, hyperfine interaction with nearby ^{13}C nuclei has been extensively characterized and is central to coherent nuclear spin control (Doherty et al., 2013).

3.4 Role of Spin–Orbit Coupling

Spin–orbit coupling (SOC) introduces additional fine-structure effects by coupling spin and orbital angular momentum. Although SOC is relatively weak in light-element hosts such as diamond, it becomes more significant in materials containing heavier elements or lower symmetry environments.

SOC contributes to anisotropic g -tensors and can mix spin states, thereby influencing relaxation pathways and coherence times. In certain defect systems, SOC also governs intersystem crossing processes between triplet and singlet states, which are essential for optical spin polarization (Doherty et al., 2013).

From a computational standpoint, incorporating SOC requires relativistic corrections within density functional theory. While SOC does not typically dominate the spin Hamiltonian in light-element systems, neglecting it can lead to inaccurate g -factor predictions and incomplete descriptions of excited-state structure (Ivady et al., 2014).

Taken together, the spin Hamiltonian framework translates atomistic electronic structure into experimentally observable spin physics. Zero-field splitting, dipolar interaction, hyperfine coupling, and spin–orbit effects are not independent corrections but interconnected components that define qubit addressability, tunability, and coherence. Accurate first-principles modeling of these parameters is therefore essential for predictive defect qubit engineering.

4. Charge Transition Levels and Optical Properties

The functionality of a defect-based qubit is not determined solely by its spin structure. Equally important is the stability of its charge state and its interaction with light. In practice, many defect centers can exist in multiple charge configurations, and only specific ones exhibit the spin multiplicity required for qubit operation. Consequently, understanding charge transition levels and optical

excitation mechanisms is essential for both theoretical modeling and experimental implementation.

4.1 Defect Formation Energy Formalism

The thermodynamic stability of a defect in a given charge state is quantified through its formation energy. Within first-principles frameworks, the formation energy of a defect in charge state q is expressed as

$$E_f(q) = E_{\text{defect}}(q) - E_{\text{bulk}} + \sum_i n_i \mu_i + q(E_F + E_v) + E_{\text{corr}}.$$

Here, $E_{\text{defect}}(q)$ and E_{bulk} denote the total energies of the defective and pristine supercells, n_i represents the number of atoms exchanged with reservoirs of chemical potential μ_i , E_F is the Fermi level referenced to the valence band maximum E_v , and E_{corr} accounts for finite-size electrostatic corrections (Freysoldt, Neugebauer, & Van de Walle, 2014).

This formalism allows one to determine which charge state is thermodynamically favorable under given growth conditions and Fermi level positions. In diamond, for example, the negatively charged NV^- state is stabilized when the Fermi level lies sufficiently high in the band gap, whereas the neutral NV^0 state becomes favorable under more p-type conditions (Gali, 2009). Such distinctions are not merely academic; the NV^- center hosts the spin-triplet ground state required for qubit applications, while NV^0 does not provide the same spin coherence properties.

Accurate prediction of formation energies requires careful treatment of electrostatic corrections and band-gap alignment. Hybrid functionals or quasiparticle corrections are often necessary to avoid systematic underestimation of transition levels relative to experimental measurements (Deák et al., 2014).

4.2 Charge Transition Diagrams

Charge transition levels are defined as the Fermi-level positions at which two charge states of a defect have equal formation energy. Formally, the thermodynamic transition level $\varepsilon(q/q')$ is given by

$$\varepsilon(q/q') = \frac{E_f(q; E_F = 0) - E_f(q'; E_F = 0)}{q' - q}$$

Graphically, plotting formation energies as a function of Fermi level yields a set of linear segments whose intersections correspond to transition levels. These diagrams provide a compact and intuitive representation of charge stability across the band gap (Freysoldt et al., 2014).

For defect qubits, these diagrams serve as practical maps. They indicate whether the operational charge state can be stabilized under realistic doping or gating conditions. In silicon carbide, for instance, divacancy centers exhibit specific charge stability windows that depend sensitively on intrinsic doping and compensation mechanisms (Weber et al., 2010). If the Fermi level drifts outside this window, charge conversion processes may suppress coherent spin operation.

Beyond thermodynamic transitions, one must also consider optical (vertical) transition levels, which correspond to excitation processes occurring faster than lattice relaxation. The distinction between thermodynamic and optical transition levels becomes crucial when analyzing photoluminescence spectra and charge-state switching under illumination.

4.3 Configuration Coordinate Model

Optical transitions in defect centers are intimately coupled to lattice vibrations. When an electronic excitation occurs, the equilibrium geometry of the defect generally changes. The configuration coordinate model provides a simple yet powerful framework for describing this interplay between electronic and vibrational degrees of freedom (Alkauskas, Buckley, Awschalom, & Van de Walle, 2014).

In this model, the potential energy surfaces of ground and excited electronic states are represented as displaced harmonic parabolas along a generalized configuration coordinate. The vertical transition between these surfaces determines the optical absorption energy, while the energy difference between relaxed minima defines the zero-phonon line (ZPL).

For the NV center in diamond, the configuration coordinate diagram explains the presence of a sharp ZPL at 1.945 eV accompanied by a broad phonon sideband (Doherty et al., 2013). The Huang–Rhys factor, which quantifies electron–phonon coupling strength, can be extracted from first-principles calculations and directly compared with experimental luminescence spectra (Alkauskas et al., 2014).

The importance of this model extends beyond spectroscopy. Electron–phonon coupling influences nonradiative recombination rates and intersystem crossing processes, both of which affect spin polarization efficiency and coherence.

4.4 Optical Excitation Pathways

Optical initialization and readout are central advantages of defect-based qubits. In many systems, optical excitation selectively populates spin sublevels via spin-dependent intersystem crossing. For the NV⁻ center, optical pumping

drives population into the $m_s = 0$ sublevel, enabling high-fidelity spin polarization at room temperature (Jelezko & Wrachtrup, 2006; Doherty et al., 2013).

These processes involve a sequence of electronic transitions between triplet and intermediate singlet states. Spin–orbit coupling facilitates nonradiative transitions between manifolds of different spin multiplicity, creating a pathway for spin-selective decay. The detailed rates of these processes depend on the relative energies of excited states, spin–orbit matrix elements, and phonon coupling.

From a computational standpoint, modeling optical excitation pathways requires access to excited-state electronic structure. Time-dependent density functional theory (TD-DFT) or constrained DFT approaches can provide estimates of excited-state energies, while many-body perturbation methods may be necessary for quantitative accuracy in wide band gap systems (Alkauskas et al., 2014).

Ultimately, the interplay between charge stability, lattice relaxation, and optical excitation defines whether a defect can be reliably initialized, manipulated, and read out. A defect qubit is viable only if its desired charge state is thermodynamically stable, its optical transitions are spectrally accessible, and its nonradiative pathways do not excessively compromise coherence.

5. Host Material Dependence

The intrinsic chemistry of the defect does not solely determine defect-based qubit performance. Rather, it emerges from the interplay between defect orbitals and the electronic, dielectric, and vibrational properties of the host lattice. Parameters such as band gap magnitude, dielectric screening strength, phonon density of states, and nuclear spin environment collectively define charge stability, optical linewidth, and spin coherence times (Doherty et al., 2013; Awschalom et al., 2018). In this section, we compare three representative wide band gap hosts—diamond, 4H-SiC, and h-BN—from an atomistic perspective.

5.1 NV Center in Diamond

The nitrogen–vacancy (NV) center in diamond remains the benchmark system for solid-state defect qubits. Its remarkable performance stems in large part from the exceptional properties of the diamond host. Diamond combines an ultra-wide band gap (~ 5.5 eV), high thermal conductivity, and low intrinsic spin density due to the predominance of spin-zero ^{12}C nuclei. These features collectively suppress unwanted electronic and magnetic noise sources (Doherty et al., 2013).

The wide band gap ensures that the NV^- defect levels are deeply embedded within the forbidden region, reducing thermal ionization at room temperature. At the same time, the stiff covalent lattice limits phonon-induced broadening, contributing to long spin coherence times that can reach milliseconds in isotopically purified samples (Jelezko & Wrachtrup, 2006).

From an electronic structure standpoint, the high symmetry of the diamond lattice (prior to defect formation) simplifies the interpretation of defect-induced levels. However, the NV center itself lowers the symmetry to C_{3v} , enabling the formation of well-defined a_1 and e states that support a spin-triplet ground state. First-principles calculations have successfully reproduced zero-field splitting parameters and hyperfine constants with quantitative accuracy when hybrid functionals are employed (Gali, 2009; Deák et al., 2014).

Despite these advantages, diamond processing and scalability remain technologically demanding. This has motivated the exploration of alternative wide band gap hosts that may offer more flexible fabrication pathways.

5.2 Divacancies in 4H-SiC

Silicon carbide (SiC), particularly the 4H polytype, has emerged as one of the most promising alternatives to diamond. Unlike diamond, SiC benefits from mature semiconductor processing technology and wafer-scale growth methods. This practical advantage has significantly accelerated experimental development (Weber et al., 2010).

In 4H-SiC, divacancy centers consist of adjacent missing silicon and carbon atoms. Because the lattice contains inequivalent crystallographic sites (hexagonal and cubic), multiple divacancy configurations are possible. Each configuration exhibits distinct optical zero-phonon lines and spin Hamiltonian parameters, reflecting subtle differences in local crystal field and dielectric environment (Koehl et al., 2011).

The band gap of 4H-SiC (~ 3.2 eV) is smaller than that of diamond, which affects both charge stability and optical excitation energies. Nevertheless, divacancy centers in SiC also support spin-triplet ground states and can be coherently controlled at room temperature. The reduced band gap slightly increases susceptibility to charge fluctuations compared to diamond, yet the material's technological compatibility compensates for this limitation in many applications.

From a theoretical perspective, modeling SiC defects requires careful treatment of polytype-dependent band structures and anisotropic dielectric

screening. These factors influence formation energies and charge transition levels, making host-specific calculations essential.

5.3 Defect Emitters in h-BN

Hexagonal boron nitride (h-BN) represents a distinctly different host platform. As a layered van der Waals material with a wide band gap (~ 6 eV), it supports optically active defect centers that function as single-photon emitters (Tran et al., 2016).

Unlike diamond and SiC, where defect structures are relatively well characterized, the microscopic identity of many h-BN emitters remains under active investigation. Proposed candidates include boron vacancies, carbon substitutions, and complex defect clusters. The reduced dimensionality of h-BN introduces additional effects: surface proximity, dielectric anisotropy, and enhanced strain sensitivity.

Because h-BN is atomically thin, its dielectric screening is weaker and highly anisotropic. This modifies Coulomb interactions and can shift defect level positions relative to bulk-like environments. As a result, defect optical properties in h-BN are particularly sensitive to substrate interactions and local electrostatic conditions.

From a computational standpoint, accurate modeling of h-BN defect centers requires inclusion of long-range electrostatic effects and, in some cases, explicit treatment of substrate-induced screening.

5.4 Comparative Dielectric Screening and Band Gap Effects

Across these host materials, two intrinsic parameters repeatedly emerge as decisive: band gap magnitude and dielectric screening strength.

A larger band gap generally stabilizes defect levels against thermal ionization and reduces overlap with bulk states. This isolation favors well-defined spin and optical transitions. However, it may also shift excitation energies into less technologically convenient spectral regions.

Dielectric screening, characterized by the static dielectric constant, governs Coulomb interactions within the defect center and between the defect and its environment. Stronger screening reduces the electrostatic cost of charged defects but may also modify hyperfine interactions and dipolar coupling strengths (Freysoldt et al., 2014).

In diamond, relatively modest dielectric screening combined with a very wide band gap provides an optimal balance for NV centers. In SiC, intermediate

screening and a smaller gap introduce trade-offs between coherence and fabrication compatibility. In h-BN, anisotropic screening and reduced dimensionality amplify environmental sensitivity.

These comparisons highlight a central point: defect qubit performance cannot be evaluated independently of the host material. The electronic structure of the defect is inseparable from the dielectric, structural, and symmetry properties of its crystalline environment. Host selection, therefore, is not merely a materials engineering decision—it is a fundamental component of qubit design.

6. Atomic-Scale Decoherence Mechanisms

Defect-based qubits derive their utility from long spin coherence times. Yet even in the most carefully engineered systems, coherence is never absolute. The localized electronic spin inevitably interacts with its surrounding lattice, nuclear spins, and electromagnetic environment. These interactions, while often weak, accumulate over time and lead to relaxation (T_1 processes) and dephasing (T_2 processes). Understanding decoherence at the atomic scale is therefore not simply a question of identifying noise sources, but of quantifying how microscopic couplings translate into macroscopic coherence limits.

6.1 Phonon Coupling

Phonons represent one of the most fundamental decoherence channels in solid-state qubits. Even at cryogenic temperatures, lattice vibrations persist and can couple to electronic spin states through modulation of crystal fields, spin–orbit interactions, or zero-field splitting parameters.

In defect centers such as the NV center in diamond, spin–lattice relaxation occurs primarily through phonon-mediated transitions between spin sublevels. At elevated temperatures, two-phonon Raman and Orbach processes become dominant, while at low temperatures direct one-phonon processes may govern relaxation (Doherty et al., 2013). The relaxation rate typically exhibits a strong temperature dependence, reflecting the phonon occupation statistics.

From a microscopic perspective, phonons perturb the electronic wavefunction and alter spin Hamiltonian parameters. For instance, lattice vibrations can modulate the D tensor, effectively inducing transitions between m_s sublevels. First-principles approaches combined with perturbation theory enable the calculation of electron–phonon coupling constants and phonon spectral densities, providing quantitative insight into spin relaxation mechanisms (Alkauskas et al., 2014).

Importantly, materials with stiff covalent bonding and high Debye temperatures—such as diamond—tend to suppress low-frequency phonon modes, thereby reducing spin–lattice relaxation rates compared to softer lattices.

6.2 Nuclear Spin Bath Interaction

Even in the absence of lattice vibrations, a defect spin remains coupled to nearby nuclear spins through hyperfine interaction. This ensemble of surrounding nuclear moments is commonly referred to as the nuclear spin bath. While individual hyperfine couplings may be weak, their collective effect can generate fluctuating magnetic fields that lead to dephasing.

In natural diamond, the presence of ^{13}C nuclei (spin-1/2) creates a fluctuating magnetic environment that limits coherence times. Isotopic purification, which reduces the concentration of spin-active nuclei, has been shown to extend coherence times by orders of magnitude (Jelezko & Wrachtrup, 2006). Similar considerations apply to silicon carbide, where isotopic engineering of ^{29}Si and ^{13}C concentrations influences decoherence rates (Koehl et al., 2011).

Theoretical modeling of nuclear spin bath effects often relies on cluster correlation expansion (CCE) techniques or stochastic approaches that simulate nuclear spin dynamics. These methods reveal that decoherence arises not simply from static hyperfine fields, but from time-dependent fluctuations due to nuclear spin flip-flop processes.

Paradoxically, the nuclear spin bath is not purely detrimental. Controlled coupling to selected nuclear spins can enable quantum memory registers and extended coherence via dynamical decoupling protocols.

6.3 Electric Field Noise

Charge fluctuations in the local environment introduce electric field noise, which can shift defect energy levels via Stark effects. In systems where defect states possess significant electric dipole moments, such fluctuations can directly modulate optical transition frequencies and spin splittings.

Electric field noise often originates from charge traps, surface states, or nearby defects that switch charge configurations. In nanostructured or near-surface devices, this effect becomes particularly pronounced. For example, shallow NV centers exhibit reduced coherence times compared to bulk defects, largely due to surface-induced electric and magnetic noise (Doherty et al., 2013).

The sensitivity of a defect to electric fields is governed by its symmetry and electronic structure. Lower symmetry environments generally enhance Stark

coupling. From a computational perspective, evaluating electric-field response requires finite-field DFT calculations or perturbative analysis of defect dipole moments.

Because electric field noise can be highly device-dependent, mitigating this decoherence channel often involves materials engineering strategies such as surface passivation or dielectric encapsulation.

6.4 Strain Sensitivity

Mechanical strain modifies crystal symmetry and alters local electronic structure. In defect-based qubits, strain can shift zero-field splitting parameters, mix spin states, and modify optical transition energies.

In diamond NV centers, axial strain changes the D parameter, while transverse strain introduces mixing between $m_s = \pm 1$ states. This strain dependence forms the basis of high-sensitivity strain-sensing applications, yet it also introduces an additional decoherence pathway when strain fluctuates (Doherty et al., 2013).

Two-dimensional hosts such as h-BN are particularly susceptible to strain-induced effects because of their reduced dimensionality and weaker interlayer interactions. Even small substrate-induced distortions can significantly perturb defect energy levels.

From a theoretical standpoint, strain effects can be modeled by applying controlled lattice distortions within first-principles calculations and evaluating the resulting changes in spin Hamiltonian parameters. Such analyses provide quantitative strain susceptibilities, which are essential for device design.

Taken together, phonon interactions, nuclear spin baths, electric field fluctuations, and strain perturbations define the primary atomic-scale decoherence mechanisms in defect-based qubits. These processes are not independent; they often act simultaneously and may even couple to one another. A comprehensive understanding of decoherence, therefore, requires an integrated perspective that links electronic structure, lattice dynamics, and environmental interactions. Only by quantifying these microscopic channels can one rationally engineer materials and devices that approach their intrinsic coherence limits.

7. Advanced First-Principles Approaches

Standard density functional theory (DFT), particularly within semilocal exchange–correlation approximations, has proven invaluable for modeling point defects. Yet when quantitative accuracy becomes critical—especially for predicting band gaps, charge transition levels, and spin-dependent parameters—

its limitations become evident. Wide band gap hosts, strongly localized defect states, and subtle spin splittings often demand methods that go beyond conventional generalized gradient approximations (GGA). In recent years, several advanced first-principles approaches have been systematically adopted to address these challenges.

7.1 Hybrid Functionals (HSE06)

One of the most widely used improvements over semilocal DFT is the incorporation of a fraction of exact Hartree–Fock exchange through hybrid functionals. Among these, the screened hybrid functional HSE06 has become a practical standard in defect physics (Heyd, Scuseria, & Ernzerhof, 2003; Krukau et al., 2006).

The principal advantage of HSE06 lies in its ability to partially correct the self-interaction error inherent in local and semilocal functionals. This correction leads to more realistic band gaps and, consequently, more accurate placement of defect-induced levels within the gap. For defect-based qubits, this is not a minor improvement. A small misalignment of defect levels relative to the band edges can lead to incorrect predictions of charge stability windows or optical excitation energies.

In the case of the NV center in diamond, hybrid functionals have demonstrated significantly improved agreement with experimentally measured zero-phonon line energies and hyperfine parameters compared to GGA-based calculations (Deák et al., 2014). Similar improvements have been reported for divacancy centers in SiC.

The trade-off, however, is computational cost. Hybrid functionals require substantially greater computational resources, particularly for large supercells necessary in defect calculations. Nonetheless, for predictive modeling of qubit-relevant parameters, the increased accuracy often justifies the expense.

7.2 GW Corrections for Defect Levels

While hybrid functionals improve band gaps, they remain within a single-particle framework. Many-body perturbation theory, particularly within the GW approximation, provides a more rigorous description of quasiparticle energies (Hedin, 1965).

In the GW approach, the electronic self-energy is approximated as the product of the Green’s function (G) and the screened Coulomb interaction (W). This framework yields corrected quasiparticle energies that often align closely with experimental photoemission and optical spectroscopy results.

For defect systems, GW corrections are particularly valuable when defect levels lie near band edges, where small errors can significantly affect predicted charge transition levels. However, applying GW to large supercells containing defects is computationally demanding. As a result, practical strategies often combine hybrid functional ground-state calculations with single-shot or partially self-consistent GW corrections for selected states (Freysoldt et al., 2014).

Although GW does not directly yield spin Hamiltonian parameters, accurate quasiparticle level positioning indirectly improves predictions of optical transitions and ionization thresholds.

7.3 Constrained DFT

Certain processes relevant to defect qubits—such as optical excitations or charge transfer—are not adequately described by ground-state DFT alone. Constrained DFT (cDFT) offers a practical means of imposing occupation constraints on selected orbitals, thereby enabling the simulation of excited or charge-separated states within a ground-state formalism.

In defect systems, cDFT can be used to model vertical excitation processes, estimate reorganization energies, and evaluate diabatic energy surfaces relevant to nonradiative transitions. This approach provides a computationally accessible alternative to fully time-dependent methods when excited-state properties are required.

Because constrained DFT explicitly controls electronic occupations, it is particularly useful for isolating specific spin or charge configurations that may not represent the global energy minimum but are physically relevant for qubit operation.

7.4 Many-Body Spin Models

Even advanced electronic structure methods ultimately produce parameters— g -tensors, hyperfine constants, zero-field splitting values—that must be interpreted within an effective spin model. Many-body spin Hamiltonians provide the bridge between atomistic calculations and experimentally measurable coherence dynamics.

In systems where multiple defect centers interact, or where coupling to nearby nuclear spins becomes significant, simplified two-level approximations are no longer sufficient. Instead, cluster models or extended spin networks must be considered. Techniques such as cluster correlation expansion (CCE) or exact diagonalization of small spin clusters are frequently employed to simulate decoherence processes beyond mean-field approximations.

Moreover, in strongly correlated systems or transition-metal-based defect centers, electron–electron interactions may require explicit many-body treatment beyond single-determinant DFT. In such cases, embedding methods or DFT+U corrections can serve as intermediate approaches before resorting to more computationally intensive many-body techniques.

Advanced first-principles methods thus extend the predictive scope of defect modeling beyond what standard DFT can offer. Hybrid functionals refine band structure alignment, GW corrections provide quasiparticle accuracy, constrained DFT enables excited-state analysis, and many-body spin models translate electronic parameters into dynamical behavior. Together, these approaches form a multi-layered computational framework capable of supporting rational defect qubit design with increasing quantitative reliability.

8. Outlook and Future Directions

Defect-based qubits have transitioned from proof-of-principle demonstrations to platforms with tangible technological relevance. What began with the optical control of single NV centers has evolved into a broader field encompassing multiple host materials, diverse defect chemistries, and increasingly sophisticated theoretical models. Looking ahead, several directions appear particularly significant.

First, materials discovery will likely expand beyond the currently dominant systems. While diamond and silicon carbide remain central, emerging two-dimensional hosts and wide band gap oxides may provide new opportunities for integrating quantum defects with scalable device architectures. Identifying suitable defects within these materials will require close coordination between first-principles prediction and targeted experimental synthesis.

Second, coherence optimization will increasingly rely on isotopic engineering, surface control, and dielectric environment design. As decoherence mechanisms become better quantified, rational materials design strategies can replace empirical optimization. In this context, predictive computational modeling will play a central role.

Third, integration into hybrid quantum architectures is expected to gain momentum. Coupling defect spins to photonic cavities, mechanical resonators, or superconducting circuits demands precise control over optical and spin properties. Achieving this control requires not only accurate electronic structure calculations but also multiscale modeling approaches that bridge atomic-scale physics and device-level engineering.

Finally, theoretical methodologies themselves will continue to evolve. Improvements in many-body methods, embedding techniques, and machine-learning-assisted electronic structure calculations may significantly reduce the computational cost of high-accuracy predictions. As computational and experimental capabilities converge, the gap between theoretical proposal and experimental realization is likely to narrow.

Defect-based qubits occupy a unique position at the intersection of condensed matter physics, materials science, and quantum information. Their continued development will depend not only on discovering new defects, but on deepening our quantitative understanding of how atomic-scale structure governs quantum functionality. The interplay between host material properties, defect chemistry, and environmental interactions remains the defining challenge—and opportunity—of this field.

References

- Abragam, A., & Bleaney, B. (1970). *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*. Oxford University Press.
- Alkauskas, A., Buckley, B. B., Awschalom, D. D., & Van de Walle, C. G. (2014). First-principles theory of nonradiative carrier capture via multiphonon emission. *Physical Review B*, 90, 075202. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.075202>
- Awschalom, D. D., Hanson, R., Wrachtrup, J., & Zhou, B. B. (2018). Quantum technologies with optically interfaced solid-state spins. *Nature Photonics*, 12(9), 516–527. <https://doi.org/10.1038/s41566-018-0232-2>
- Deák, P., Aradi, B., Kaviani, M., Frauenheim, T., & Gali, A. (2014). Formation of NV centers in diamond: A theoretical study based on calculated transitions and migration of nitrogen and vacancy related defects. *Physical Review B*, 89, 75203. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.075203>
- Doherty, M. W., Manson, N. B., Delaney, P., Jelezko, F., Wrachtrup, J., & Hollenberg, L. C. L. (2013). The nitrogen-vacancy colour centre in diamond. *Physics Reports*, 528(1), 1–45. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2013.02.001>
- Freysoldt, C., Neugebauer, J., Van de Walle, C. G. (2009). Fully ab initio finite-size corrections for charged-defect supercell calculations. *Physical Review Letters*, 102, 016402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.016402>
- Freysoldt, C., Neugebauer, J., & Van de Walle, C. G. (2014). First-principles calculations for point defects in solids. *Reviews of Modern Physics*, 86, 253–305. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>
- Gali, A. (2009). Theory of the neutral nitrogen-vacancy center in diamond and its application to the realization of a qubit. *Physical Review B*, 79(23), 235210. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.235210>
- Gruber, A., Dräbenstedt, A., Tietz, C., Fleury, L., Wrachtrup, J., & von Borczyskowski, C. (1997). Scanning confocal optical microscopy and magnetic resonance on single defect centers. *Science*, 276(5321), 2012–2014. <https://doi.org/10.1126/science.276.5321.2012>
- Hedin, L. (1965). New method for calculating the one-particle Green's function. *Physical Review*, 139, A796–A823. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.139.A796>
- Heyd, J., Scuseria, G. E., & Ernzerhof, M. (2003). Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. *Journal of Chemical Physics*, 118, 8207. <https://doi.org/10.1063/1.1564060>

- Iványi, V., Szász, K., Falk, A.L., Klimov, P.V. Christle, D.J., Janzén, E., Abrikosov, Igor A., Awschalom, D.D., Gali, A. (2014). Theoretical model of dynamic spin polarization of NV centers. *Physical Review B*, 90, 235205.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.115206>
- Jelesko, F., & Wrachtrup, J. (2006). Single defect centres in diamond: A review. *Physica Status Solidi A*, 203(13), 3207–3225.
<https://doi.org/10.1002/pssa.200671403>
- Koehl, W., Buckley, B., Heremans, F., Calusine, G., & Awschalom, D.D. (2011). Room temperature coherent control of defect spin qubits in silicon carbide. *Nature*, 479, 84–87. <https://doi.org/10.1038/nature10562>
- Krukau, A. V., Vydrov, O. A., Izmaylov, A. F., & Scuseria, G. E. (2006). Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals. *Journal of Chemical Physics*, 125, 224106.
<https://doi.org/10.1063/1.2404663>
- Makov, G., & Payne, M. C. (1995). Periodic boundary conditions in ab initio calculations. *Physical Review B*, 51, 4014–4022.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.51.4014>
- Stoneham, A. M. (2001). *Theory of Defects in Solids*. Oxford University Press.
- Tran, T. T., Bray, K., Ford, M. J., Toth, M., & Aharonovich, I. (2016). Quantum emission from hexagonal boron nitride monolayers. *Nature Nanotechnology*, 11(1), 37–41.
<https://doi.org/10.1038/nnano.2015.242>
- Weber, J. R., Koehl, W. F., Varley, J. B., Janotti, A., Buckley, B. B., Van de Walle, C. G., & Awschalom, D. D. (2010). Quantum computing with defects. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107(19), 8513–8518.
<https://doi.org/10.1073/pnas.1003052107>