

**T.C.**  
**SÜLEYMEN DEMİREL ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ÇEKİRDEK MAGNETİK REZONANS BİLGİSAYARLARINDA ÇOKLU  
ÇMR PULS DİZİLERİNİN KULLANIMI**

**ALİ GÜLEÇ**

**Danışman: PROF. DR. SEMİHA BAHÇELİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**ISPARTA 2005**

**ÇEKİRDEK MAGNETİK REZONANS  
BİLGİSYARLARINDA ÇOKLU  
ÇMR PULS DİZİLERİNİN KULLANIMI**

**Ali GÜLEÇ**

**Yüksek Lisans Tezi  
FİZİK ANABİLİM DALI  
ISPARTA 2005**

**İÇİNDEKİLER****Sayfa No**

İÇİNDEKİLER.....	i
ÖZET.....	iii
ABSTRACT.....	iv
TEŞEKKÜR.....	v
SİMGELER DİZİNİ.....	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	x
1. GİRİŞ.....	1
2. KAYNAK BİLİĞİSİ.....	3
2.1. Çekirdek Magnetik Rezonans'ta (ÇMR) Temel Etkileşmeler.....	3
2.1.1. Çekirdeğin Magnetik Özellikleri.....	3
2.1.2. Düzgün Dış Magnetik Alandaki Çekirdek Sistemi.....	4
2.1.3. Serbest İndüksiyon Bozunumu.....	6
2.1.4. ÇMR'da Temel Etkileşmeler.....	8
2.1.4.1. Zeeman Etkileşmesi.....	8
2.1.4.2. Spin-spin Çiftlenimi.....	9
2.1.4.3. Kimyasal Kayma.....	11
2.1.5. Yoğunluk Matrisi.....	12
2.2. Çarpım Operatör Kuramı.....	14
2.2.1. Radyofrekans Pulslarının Çarpım İşlemciler Üzerine Etkisi.....	15
2.2.2. Kimyasal Kayma Hamiltoniyeninin Çarpım İşlemciler Üzerine Etkisi.....	16
2.2.3. Zayıf Çiftlenimli Spin-Spin Çiftlenim Hamiltoniyeninin Çarpım İşlemciler Üzerine Etkisi.....	18
2.3. Kuantum Bilgisayarları.....	19
2.3.1. Bit ve Kübit.....	19
2.3.2. Mantık Geçitleri.....	23
2.4. ÇMR Bilgisayarları.....	25
2.4.1. Tek Kübit Geçidi : DEĞİL.....	28
2.4.2. İki Kübit Geçidi: DENETİMLİ-DEĞİL.....	28

3. MATERYAL VE METOT.....	31
3.1. Kutuplanma Aktarımı.....	31
3.2. Zayıf Çiftlenimli IS ( $I=1/2$ , $S=1/2$ ) Spin Sistemi için INEPT ÇMR Deneyi.....	34
3.3. Zayıf Çiftlenimli IS ( $I=1/2$ , $S=1/2$ ) Spin Sistemi için DEPT ÇMR Deneyi.....	37
4. ARAŞTIRMA BULGULARI.....	41
4.1. Denetimli-Değil (CN) Mantık Geçidi olarak İki Kübitli IS ( $I=1/2$ , $S=1/2$ ) Sistemi için INEPT ÇMR Deneyi.....	41
4.2. Zayıf Çiftlenimli ( $I=1/2$ , $S=1/2$ ) Spin Sistemi için DEPT ÇMR Deneyinin Değil Mantık Geçidi olarak kullanımı.....	49
4.3. Zayıf Çiftlenimli ( $I=1/2$ , $S=3/2$ ) Spin Sistemi için INEPT ÇMR Deneyinin Denetimli –Değil (CN) Mantık Geçidi Gibi Kullanımı.....	52
5.TARTIŞMA VE SONUÇ.....	65
6. KAYNAKLAR.....	66
ÖZGEÇMİŞ.....	68

## ÖZET

Bu çalışmada, çok-pulslu ÇMR deneylerinden INEPT ve DEPT puls dizilerinin, zayıf çiftlenimli bir IS ( $I=1/2$ ,  $S=1/2$ ) spin sistemi için çarpım operatör tanımlamaları, Dirac gösterimindeki spin durumları üzerine uygulanmıştır. Bu uygulama, INEPT puls dizisinin kuantum bilgisayarlarındaki bir denetimli-değil (controlled-not ya da kısaca CN) mantık geçidi gibi davrandığını göstermiştir. Benzer bir süreçle, DEPT puls dizisinin de, bir değil (NOT) mantık geçidi gibi işlevi olabileceği anlaşılmıştır.

Ayrıca, çalışmamızda, INEPT puls dizisinin zayıf çiftlenimli bir IS ( $I=1/2$ ,  $S=3/2$ ) spin sistemi için çarpım operatör tanımlamaları, Dirac gösterimindeki sekiz spin durumu üzerine uygulanmıştır. Elde edilen sonuçlar, denetimli-değil mantık geçidi çerçevesinde tartışılmıştır.

**ANAHTAR KELİMELER:** ÇMR, INEPT ve DEPT Puls Dizileri, Çarpım Operatör Kuramı, Denetimli-değil (CN) mantık geçidi, Değil (NOT) mantık geçidi.

**ABSTRACT**

In this work, the product operator descriptions of the INEPT and DEPT pulse sequences as the multi-pulsed NMR experiments for a weakly coupled IS ( $I=1/2$ ,  $S=1/2$ ) spin system have been acted on their spin states in Dirac's notation. This application exhibits that the INEPT pulse sequence behaves like a controlled-not ( or briefly CN) logic gate in the quantum computers. By a similar procedure, it is understood that the DEPT pulse sequence may have also a function like a NOT logic gate.

Furthermore, in our work the product operator descriptions of the INEPT pulse sequence for a weakly coupled IS ( $I=1/2$ ,  $S=3/2$ ) spin system has been acted on their eight spin states in Dirac's notation. The results obtained have been discussed in the framework of the controlled-not logic gate.

**KEY WORDS:** NMR, INEPT and DEPT Pulse Sequences, Product Operator Theory, Controlled-Not logic gate, NOT logic gate.

**TEŞEKKÜR**

Bu güncel tez konusunu veren, tezi hazırlamamda ilgi ve desteğini esirgemeyen, gerekli çalışma ortamını hazırlayan, Danışman Hocam, Sayın Prof. Dr. Semiha BAHÇELİ'ye şükranlarımı sunarım. Ayrıca, bilgisayar benzetişimindeki tartışmalarıyla tezime katkıda bulunan Sayın Arş. Gör. Ahmet Tokatlı'ya da teşekkür ederim.

**13/12/2004**

**ALİ GÜLEÇ**

## SİMGELER DİZİNİ

$\vec{M}$	Mıknatıslanma vektörü
$\vec{\mu}$	Magnetik moment vektörü
$\vec{I}$	Spin açısal momentum vektörü
$\gamma$	Çekirdeğin jromagnetik oranı
$m_l$	Magnetik spin kuantum sayısı
$\vec{B}_0$	Magnetik alan vektörü
$T_2$	Spin-spin durulma zamanı
$H$	Hamiltoniyen
$\hbar$	Planck sabiti
$\omega$	Açısal frekans
$\alpha$	Dış magnetik alana paralel spin
$\beta$	Dış magnetik alana antiparalel spin
$J$	Çiftlenim sabiti
$A$	Operatör
$A_{nm}$	Matris gösterimi
$\langle A \rangle$	A'nın beklenen değeri
$\rho, \sigma$	Yoğunluk operatörü
$\tau$	Gelişme zamanı
$\Omega$	Kimyasal kayma açısal frekansı
$\Psi(\vec{r}, t)$	Dalga fonksiyonu
ÇMR	Çekirdek magnetik rezonans

INEPT	Kutuplanma aktarımı ile duyarsız çekirdeklerin sinyal şiddetini arttırma deneyi
DEPT	Kutuplanma aktarımı ile bozunumsuz sinyal şiddetini arttırma deneyi
SİB	Serbest indüksiyon bozunumu
PT	Kutuplanma aktarımı (Polarization transfer)
CN	Denetimli-değil mantık geçidi
NOT	Değil mantık geçidi

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No

Şekil 2.1.1.1. Klasik olarak çekirdek spini.....	3
Şekil 2.1.2.1. (a) Spinlerin dış magnetik alan uygulanmadan önceki rasgele dağılımı, (b) Durgun dış magnetik alan uygulandığında spinlerin alan doğrultusunda yönelmeleri.....	4
Şekil 2.1.2.2. (a) $I=1/2$ spinli bir çekirdeğin $\vec{B}_0$ dış magnetik alan içindeki farklı iki yönelimi, (b) Makroskobik bir örnekteki paralel ve antiparalel yönlenecek çekirdeklerin presesyon hareketleri.....	5
Şekil 2.1.3.1. (a) Mıknatıslanma vektörü (b) Mıknatıslanma vektörünün r.f. pulsundan sonra $y'$ eksenine yatması (c) Spinlerin $z'$ eksenine yönelmeleri (d) SİB sinyali.....	6
Şekil 2.1.4.1. $I = \frac{1}{2}$ spinli çekirdeklerin, $\vec{B}_0 = B_0 \vec{k}$ durgun dış magnetik alandaki Zeeman enerji düzeyleri ve enerji aralığı.....	8
Şekil 2.1.4.2. (a) S spininin, komşusu I spininin $\alpha$ ve $\beta$ durumlarına bağlı olarak gördüğü alanın yönü (b) S'nin rezonansının ikiye yarılması.....	10
Şekil 2.3.1.1. Bit ve Kübit.....	20
Şekil 2.3.1.2. Bloch Küresi.....	21
Şekil 2.3.2.1. Bilginin İşlem ve Bellek Elemanlarına İletilmesi.....	23
Şekil 2.3.2.2. Kuantum Bilgisayarın İşleyişi.....	23
Şekil 2.4.1. Bloch Küresi Üzerinde Durumlar.....	25
Şekil 3.1.1. $^1\text{H}$ ve bir $^{13}\text{C}$ 'den oluşan sistem için enerji düzeyleri ve geçişler. Burada proton geçişleri için şiddet $2\Delta H$ iken $^{13}\text{C}$ geçişleri için şiddet, $2\Delta C$ dir.....	31

Şekil 3.1.2. Proton ve karbon-13 spektrumları.....	32
Şekil 3.1.3. Kutuplanma aktarımındaki geçiş şiddetleri.....	33
Şekil 3.1.4. $^{13}\text{C}$ için PT'siz ve PT'li spektrumlar.....	33
Şekil 3.2.1. INEPT Puls Dizisi.....	34
Şekil 3.3.1. DEPT Puls Dizisi.....	37
Şekil 4.1.1. $\text{CHCl}_3$ kloroform için $^{13}\text{C}$ INEPT spektrumu.....	47
Şekil 4.1.2. Sıvı kristal çözeltideki $^{13}\text{C}^1\text{HCl}_3$ 'ün soğurma ve yayılma çizgileri.....	48
Şekil 4.2.1. Maple programı kullanılarak kloroformdaki (CH) metin grubu için elde edilen spektrum.....	52
Şekil 4.3.1. INEPT puls dizisi.....	52

**ÇİZELGELER DİZİNİ****Sayfa No**

Çizelge 2.1.4.1. İki tane $I=1/2$ spinli çekirdek için Zeeman Hamiltoniyeninin özfonksiyonları ve özdeğerleri.....	9
Çizelge 2.2.1. IS ( $I=1/2$ , $S=1/2$ ) spin sistemi için çarpım operatörleri.....	15
Çizelge 2.2.1.1. Radyofrekans hamiltoniyeninin çarpım operatörleri üzerine etkisi.....	16
Çizelge 2.3.2.1. Temel Mantık Geçitleri.....	24
Çizelge 2.4.2.1. Denetimli-Değil Geçidi için Doğruluk Çizelgesi ve Denetimli-Değil Mantık Geçidinin Gösterimi.....	29
Çizelge 2.4.2.2. ÖZEL-VEYA Mantık Geçidinin Doğruluk Çizelgesi.....	29
Çizelge 2.4.2.3. $CN_2$ Geçidi için Doğruluk Çizelgesi.....	30
Çizelge 4.1.1. Zayıf çiftlenimli IS ( $I=1/2$ , $S=1/2$ ) spin sistemi için INEPT ÇMR deneyinin CN mantık geçidi gibi davranışı.....	45
Çizelge 4.2.1. Zayıf çiftlenimli IS ( $I=1/2$ , $S=1/2$ ) spin sistemi için DEPT ÇMR deneyinin Değil mantık geçidi gibi davranışı.....	51
Çizelge 4.2.2. $^{13}C^1HCl_3$ için DEPT ÇMR deneyinin metin grubu için elde edilen sinyal şiddetleri.....	51
Çizelge 4.3.1. IS ( $I=1/2$ , $S=3/2$ ) INEPT ÇMR deneyinin CN mantık geçidi olarak sonuçları.....	64

## 1. GİRİŞ

Günümüzdeki bilgisayar teknolojisinde, gün geçtikçe daha hızlı ve daha etkin hesaplama yönelik önemli adımlar gözlenmektedir. Bilgisayarlar, başlangıçta mekanik bir yapıya sahip iken zaman içerisinde elektronikte toplu (entegre) devreler, bilgisayarların yeni yapı taşlarını oluşturdu ve önceki bilgisayar teknolojisinde kullanılan rölelerin, vakum tüplerinin ve transistörlerin yerini aldılar. Yani, bilgisayar devrelerindeki eleman sayısı arttıkça, kullanılan elektronik elemanların boyutları küçülmüştür. Bugün için bilgisayarların toplu işlemcilerinde, 42 milyon adet transistör bulunmaktadır. Bu sayı, her yıl ikiye katlanarak artmaktadır. Gelecekte mikroelettronik elemanların birkaç atomdan oluşan modelleri karşımıza çıkabilecektir. Alışılmış (klasik) bilgisayarların işlem gücünün artmasına karşın, çözemeyeceğimiz bazı problemler bulunmaktadır. Daha etkin ve hızlı hesaplama için kuantum kuramlarının geçerli olduğu algoritmalara (akış çizelgelerine) göre çalışan yeni kuantum bilgisayarları için yorucu ama heyecan verici çalışmalar yapılmaktadır.

Kuantum kuramlarından yararlanarak algoritmalar oluşturma kavramı, 1980'li yıllarda başlamıştır. Paul Benioff, kuantum bilgisayarı için bir mantık geçidi tasarladı. 1982'de kuantum fiziksel bir sistemin bilgisayar benzetişiminin, klasik bilgisayarlarda klasik olasılık yöntemler kullanılarak etkili bir biçimde yapılamayacağı, ancak kuantum bilgisayarlarıyla bunun mümkün olacağı, Feynman tarafından önerildi. 1994 yılında ise Peter Shor, kuantum bilgisayarları için bir algoritma geliştirdi. Böylece, yüzlerce haneden oluşan sayıları çok kısa sürede çarpanlara ayırmak için algoritma araştırmaları arttı ve bir ya da birkaç mantık geçidinden oluşan kuantum bilgisayarları ortaya çıkmaya başladı.

1997'de, Gershenfeld, Chuang ve Cory birbirlerinden ayrı olarak, çekirdek magnetik rezonans tekniğinin kuantum hesaplamalarında yararlı ve gerçekçi bir yöntem olduğunu öne sürdüler. ÇMR bilgisayarları olarak bilinen bu yaklaşımda, düzgün bir dış magnetik alandaki spini  $I=1/2$  olan bir çekirdeğin iki enerji durumu, sistemin bilgisini taşıyan kübit (kuantum bit) olarak kullanılmaktadır ve çok pulslu ÇMR deneyleri, kuantum mantık geçitleri olarak tasarlanırlar.

Bu çok – pulslu ÇMR deneylerinden INEPT (Insensitive Nuclei Enhanced by Polarization Transfer) puls dizisi, magnetik olarak duyarlılığı az olan (yani, düşük jiromagnetik oranlı ve düşük doğal bolluğu olan) çekirdeklerin sinyal şiddetini arttırmak için kullanılabilir.

Benzer amaçla kullanılan diğer bir ÇMR puls dizisi de, DEPT (Distortionless Enhanced by Polarization Transfer) deneyidir. Ancak DEPT puls dizisi, zayıf çiftlenimli çekirdekler için birden daha fazla sayıda J (spin çiftlenim sabiti) değeri içeriliyorsa, INEPT puls dizisine karşılık tercih edilen bir deneydir. Bu çalışmada, çarpım operatör kuramı ile analitik olarak tanımlanan INEPT ve DEPT puls dizilerinin, zayıf çiftlenimli IS( I=1/2; S=1/2) spin sistemleri için her aşamada elde edilen yoğunluk operatörlerinin, iki kübitin dört farklı girişine uygulanması, Dirac gösterimi kullanılarak yapılmıştır. Bunun sonucunda, zayıf çiftlenimli bir IS( I=1/2, S=1/2) spin sistemi için INEPT puls dizisinin, günümüzdeki kuantum bilgisayarlarında kullanılan denetimli – değil ( controlled – not, ya da kısaca CN ) olarak bilinen bir mantık geçidi gibi işlev gördüğü anlaşılmıştır. Yani, moleküllerin, içerdikleri çekirdeklerin belli bir durumunda bir bilgisayarı temsil edebildikleri düşüncesi ağırlık kazanmıştır. Benzer biçimde, aynı yöntem kullanılarak, zayıf çiftlenimli bir IS( I=1/2, S=1/2) spin sistemi için DEPT puls dizisinin de, yine bilgisayarlarda bulunan bir NOT (değil) mantık geçidi gibi işlev gördüğü ortaya çıkmıştır.

Ayrıca, zayıf çiftlenimli bir IS ( I=1/2, S= 3/2) spin sistemi için sekiz farklı girişe INEPT puls dizisi yoğunluk matrislerinin, Dirac gösterimindeki uygulanması gerçekleştirilmiştir. Hesaplamaların sonucunda elde edilen verilerin, bir IS ( I=1/2, S= 3/2) spin sisteminin sekiz ayrı durumunun, sekiz girişi olan bir denetimli – değil mantık geçidi kavramı içerisinde tartışması yapılmıştır.

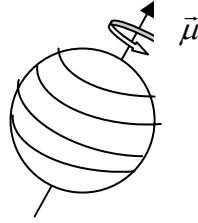
## 2. KAYNAK BİLGİSİ

### 2.1. Çekirdek Magnetik Rezonans'ta (ÇMR) Temel Kavramlar

Bu kesimde, ÇMR'nin temel kavramlarını kısaca ele almak yararlı olacaktır.

#### 2.1.1. Çekirdeğin Magnetik Özellikleri

Çekirdek Magnetik Rezonans spektroskopisinin temeli, çekirdeğin magnetik özelliğine dayanır. Bazı atom çekirdeklerinin yük ve kütlelerinin olmasının yanında bir de spin yani, iç açısal momentumları vardır. Çekirdeği, küre biçiminde ve kendi ekseni etrafında dönen bir cisim olarak düşünebiliriz (Şekil 2.1.1.1). Çekirdeğin kendi ekseni etrafındaki dönme hareketi, bir I kuantum sayısı ile belirlenir ve çekirdeğe I spinli çekirdek denir. Öte yandan çekirdek bir yüke sahip olduğundan, kendi ekseni etrafındaki dönmesinin bir elektrik akımını oluşturduğu düşünülebilir. Klasik fizikte dönen bir yük veya çember biçimindeki bir telden geçen akım,  $\vec{\mu}$  vektörü ile gösterilen magnetik momentin tanımını sağlar.  $\vec{\mu}$  magnetik moment vektörü,  $\vec{I}$  çekirdek spin açısal momentum vektörüne paraleldir.



Şekil 2.1.1.1. Klasik olarak çekirdek spini

Yani,

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{I} \quad (2.1.1.1)$$

dir. Burada  $\gamma$ 'ya çekirdeğin jromagnetik oranı denir ve

$$\gamma = \frac{g_N \mu_N}{\hbar} \quad (2.1.1.2)$$

olarak tanımlanır. Burada  $g_N$ , çekirdeğin g-çarpanı ve  $\mu_N$ , çekirdek magnetonudur.

Çekirdeğin  $\vec{I}$  spin açısal momentum vektörü, kuantumlu bir niceliktir. Bir vektörün kuantumlu olması demek, büyüklüğünün ve yöneliminin kuantumlu olması demektir.  $\vec{I}$  vektörünün büyüklüğünün kuantumluluğu,

$$|\vec{I}| = \sqrt{I(I+1)}\hbar \quad (2.1.1.3)$$

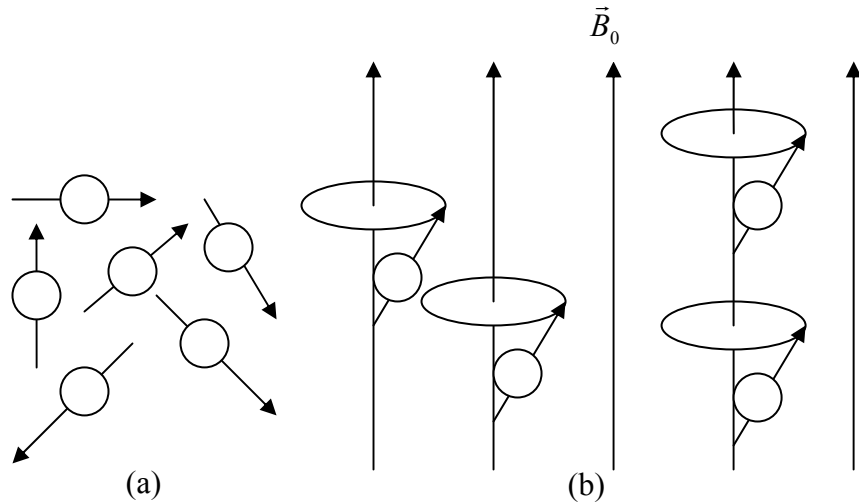
ve yöneliminin kuantumluluğu ise,

$$I_z = m_I \hbar \quad (2.1.1.4)$$

ile tanımlanır. Burada  $m_I$  magnetik spin kuantum sayısıdır ve  $m_I = \pm I, \pm I-1, \pm I-2...$  gibi toplam  $2I+1$  değer alır ( Apaydın, 1991 ve Bahçeli, 1996).

### 2.1.2. Düzgün Dış Magnetik Alandaki Çekirdek Sistemi

Spini  $I$  olan çekirdek spin sisteminde, spinler rasgele doğrultularda dağılırlar ve sistemin net magnetik dipol momentini sıfırdır (Şekil 2.1.2.1.a). Bu sisteme  $+z$ -doğrultusunda durgun bir dış magnetik alan uygulanırsa, spinler alan doğrultusunda yönelmeye çalışırlar (Şekil 2.1.2.1.b).

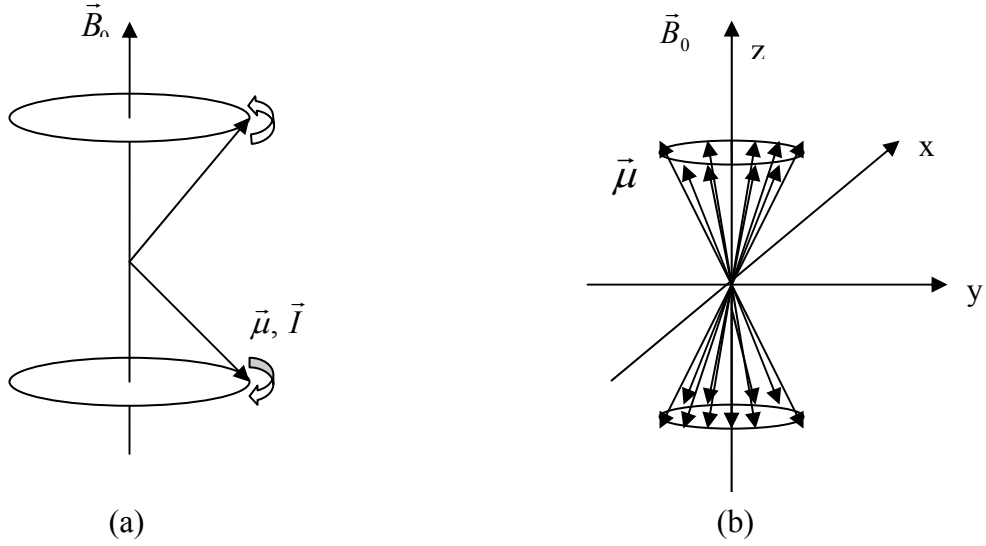


Şekil 2.1.2.1. (a) Spinlerin dış magnetik alan uygulanmadan önceki rasgele dağılımı, (b) Durgun dış magnetik alan uygulandığında spinlerin alan doğrultusunda yönelimleri

Dış magnetik alan  $\vec{B} = 0$ 'sa, çekirdeklerin aynı enerjili  $2I+1$  yönelim durumları vardır. Dış magnetik alan uygulandığında, çekirdek spinleri alan doğrultusunda yönelmeye çalıştıklarından, farklı enerji değerlerini alırlar.

$I=1/2$  spinli bir çekirdek için  $\vec{B}_0 = B_0 \vec{k}$  dış magnetik alanında,  $\vec{\mu}$  magnetik dipol moment vektörünün iki yönelimi vardır (Şekil 2.1.2.2.a) (Apaydın, 1991).  $\vec{\mu}$  magnetik dipol moment vektörüne,  $\vec{B}_0$  magnetik alanı içinde  $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}_0$  torku etki eder. Çekirdeğin, kendi dönme ekseninin doğrultusunu korumaya çalışması sonucu  $\vec{\mu}$  magnetik momentini presesyon hareketi yapar. Tıpkı bir topaç gibi z- eksenini etrafında bir koni yüzeyi tarar. Buna Larmor presesyon hareketi, hareketin frekansına da Larmor frekansı denir.

Makroskobik bir örnek dikkate alınırsa, örnekteki tüm çekirdeklerin magnetik momentleri, dış magnetik alan etrafında Larmor frekansı ile presesyon hareketi yaparlar (Şekil 2.1.2.2.b).

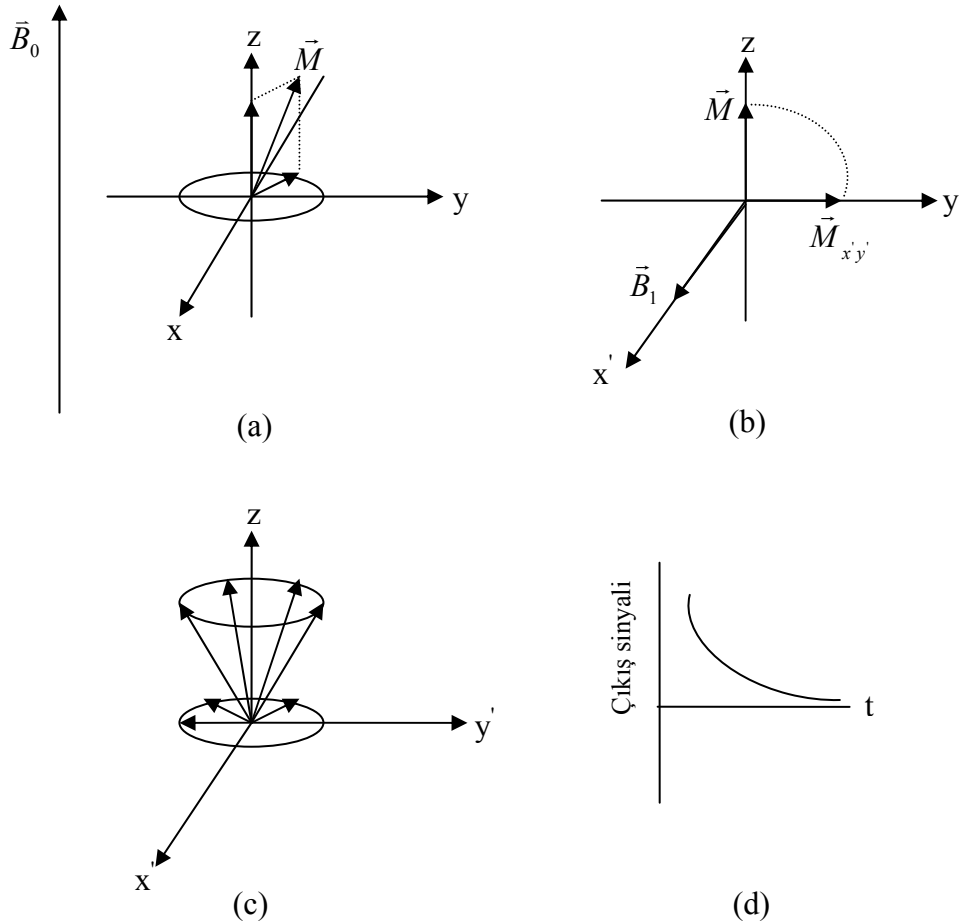


Şekil 2.1.2.2. (a)  $I=1/2$  spinli bir çekirdeğin  $\vec{B}_0$  dış magnetik alan içindeki farklı iki yönelimi, (b) Makroskobik bir örnekteki paralel ve antiparalel yönlenecek çekirdeklerin presesyon hareketleri

### 2.1.3. Serbest İndüksiyon Bozunumu (SİB)

Makroskobik magnetik moment vektörünün, z- yönünde ve (xy) düzleminde bileşenleri vardır (Şekil 2.1.3.1.a). Makroskobik bir örnekte, magnetik momentler bir koni üzerinde istatistiksel bir şekilde dağılmışlardır. Bunların (xy) düzleminde bulunan bileşenleri bu düzlem üzerinde her yönde dağılacığından bu vektörlerin toplam değeri sıfırdır.

Magnetik moment vektörü  $\vec{\mu}$ 'nün, z- doğrultusundaki bileşenlerinin tümü aynı yönde olduğundan vektörler toplanır. Toplam,  $\vec{M}$  mıknatıslanma vektörü ile gösterilir. Protonların paralel ve anti paralel yönelmesini göstermek için kullanılan ok işaretleri gerçekte toplam mıknatıslanmayı ifade etmektedir.



Şekil 2.1.3.1. (a) Mıknatıslanma vektörü (b) Mıknatıslanma vektörünün r.f. pulsundan sonra  $y'$  eksenine yatması (c) Spinlerin  $z'$  eksenine yönelmeleri (d) SİB sinyali (Farrar and Becker, 1971)

z- doğrultusunda uygulanan  $\vec{B}_0$  durgun dış magnetik alanı içerisinde toplam mıknatıslanması  $\vec{M}$  olan spin sistemine, z'- eksenini laboratuvar sisteminin z- eksenini ile çakışan ve bu eksen etrafında  $\omega_0$  Larmor frekansı ile dönen bir sistemde, x'- eksenini doğrultusunda bir  $\vec{B}_1$  radyo frekanslı puls uygulayalım.  $\theta = 90^\circ$  olacak biçimde radyo frekans pulsu uygularsak  $\vec{M}$  vektörü (x'y') düzleminde y' eksenini boyunca yatar (Şekil 2.1.3.1.b). Başlangıçta (x'y') düzleminde hiçbir bileşeni bulunmayan  $\vec{M}$  mıknatıslanmasının artık (x'y') düzleminde bir  $\vec{M}_{x'y'}$  bileşeni vardır. Laboratuvar sisteminde mıknatıslanma vektörü  $\vec{M}_y$ , (xy) düzleminde Larmor frekansı ile dönerken, döner koordinat sisteminde y' yönünde sabit kalmaktadır.

Eğer cihaz, eksenini y' – doğrultusunda olan bir kangalda indüklenmiş sinyalleri alacak biçimde düzenlenmişse,  $\vec{M}_{x'y'}$  vektörünün büyüklüğü, gözlenen sinyalin şiddetini belirtir. Bu sinyale, serbest indüksiyon bozunum sinyali (ya da kısaca SİB) denir.

$\vec{M}$  vektörü, (x'y') düzleminde y' – eksenini doğrultusundaki alıcı kangal ekseninin doğrultusuna geldiğinde, kangal içerisindeki magnetik momentler bir akı oluşturduklarından, spinler presesyon hareketi yaptıkça, bu akı da değişir. Sonuçta kangalda bir indüksiyon akımı oluşur. Bu akım,  $\vec{M}_{x'y'}$ 'nin büyüklüğü ile orantılıdır. Ancak spinlerin birbiriyle olan etkileşmeleri bir bozunmaya neden olurlar ve z- eksenini doğrultusunu almak üzere yeniden bir presesyon hareketine başlarlar (Şekil 2.1.3.1.c). Spinler presesyon yaparak tekrar z'-eksenini doğrultusuna yönelirler. Bu biçimde serbest indüksiyon bozunum sinyali gözlenir (Şekil 2.1.3.1.d). Matematiksel olarak bu sinyali,  $\vec{M}(t) = \vec{M}_0 \exp(-\frac{t}{T_2})$  biçiminde formüle edebiliriz. Burada,  $\vec{M}_0$ , t=0 anındaki mıknatıslanmayı,  $T_2$  de, spin-spin durulma zamanını yani enine durulma zamanını göstermektedir.

### 2.1.4. ÇMR'da Temel Etkileşmeler

Çekirdek spinleri tamamen yalıtılmış bir ortamda bulunmazlar. Bu nedenle, spin sisteminin dış magnetik alanla etkileşmesini (Zeeman etkileşmesi), birbirleriyle olan etkileşmelerini (spin-spin etkileşmeleri) ve çevresiyle (kimyasal etkileşmeleri) etkileşmelerini açıklamak yararlı olur.

#### 2.1.4.1. Zeeman Etkileşmesi

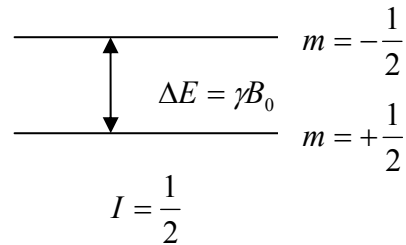
Çekirdek spin sisteminin, durgun dış magnetik alanla etkileşmesi Zeeman Etkileşmesi adını alır ve  $H_z$  Zeeman Hamiltoniyeni ile temsil edilir.  $\vec{I}$  spinli bir çekirdek,  $\vec{B}_0 = B_0 \vec{k}$  gibi durgun bir dış magnetik alana yerleştirildiğinde, çekirdekle magnetik alan arasındaki Zeeman etkileşme hamiltoniyeni,

$$H_z = -\gamma \hbar \vec{B}_0 \cdot \vec{I} \quad (2.1.4.1)$$

dır ve bu Hamiltoniyenin enerji özdeğerleri de

$$E_m = -m \hbar \gamma B_0 \quad (2.1.4.2)$$

ile verilir. Burada  $m$  magnetik spin kuantum sayısıdır ve  $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm I$  değerlerini alır. Spini  $I=1/2$  olan bir sistem için  $\vec{B}_0$  dış durgun alandaki enerji düzeyleri ve enerji aralığı Şekil 2.1.5'de gösterilmiştir. Spinlerin Zeeman enerji düzeyleri arasındaki  $\Delta E$  enerji farkı,  $B_0$  ile orantılıdır.  $B_0$ , iki katına çıkarılırsa enerji farkları da iki katı artar.



Şekil 2.1.4.1.  $I = \frac{1}{2}$  spinli çekirdeklerin,  $\vec{B}_0 = B_0 \vec{k}$  durgun dış magnetik alandaki Zeeman enerji düzeyleri ve enerji aralığı

Spin kuantum sayısı  $I=1/2$  olan iki çekirdekten oluşmuş bir sistem için  $H_z$ 'nin özfonksiyonları ve özdeğerleri Çizelge (2.1.4.1)'de gösterilmiştir.

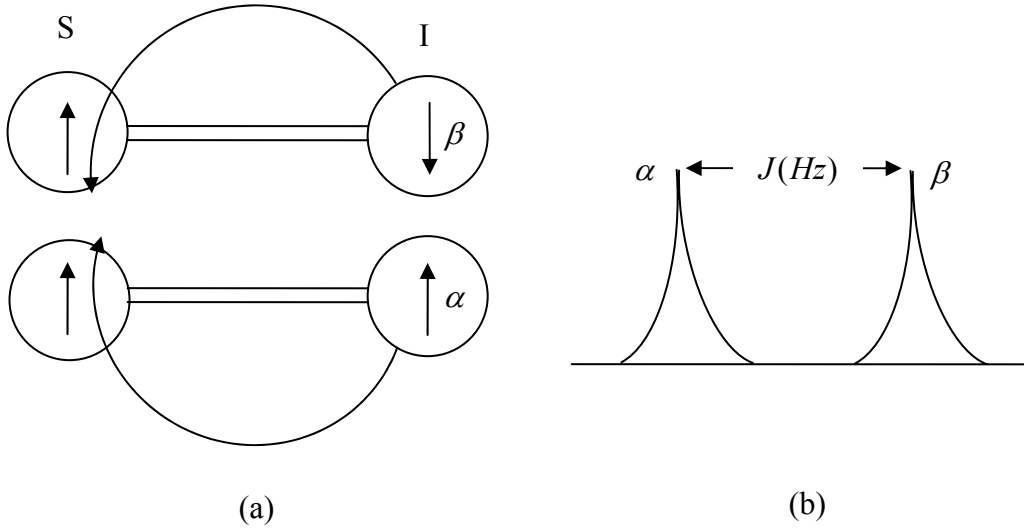
Çizelge 2.1.4.1. İki tane  $I=1/2$  spinli çekirdek için Zeeman Hamiltoniyeninin özfonksiyonları ve özdeğerleri

Özfonksiyon	$H_z$ nin özdeğerleri	$\omega_1 = \omega_2 = \omega_0$ için $H_z$ nin özdeğerleri
$ 0\rangle = \left  +\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle =  ++\rangle$	$\frac{1}{2} \hbar(\omega_1 + \omega_2)$	$\hbar\omega_0$
$ 1\rangle = \left  +\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle =  +-\rangle$	$\frac{1}{2} \hbar(\omega_1 - \omega_2)$	0
$ 2\rangle = \left  -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right\rangle =  -+\rangle$	$-\frac{1}{2} \hbar(\omega_1 - \omega_2)$	0
$ 3\rangle = \left  -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle =  --\rangle$	$-\frac{1}{2} \hbar(\omega_1 + \omega_2)$	$-\hbar\omega_0$

### 2.1.4.2. Spin-Spin Çiftlenimi

Zeeman etkileşimine göre daha zayıf olan ve spin-spin çiftlenimi denilen bir magnetik etkileşme daha vardır. Bu çiftlenimi şöyle açıklayabiliriz.

Verilen bir S spini, aynı moleküldeki komşu spinlerin varlığına duyarlıdır ve onların, magnetik alana paralel ya da antiparalel olup olmadıklarını algılayabilir. Paralel ve antiparalel durumları  $\alpha$  ve  $\beta$  olarak gösterebiliriz. Şekil 2.1.4.2.(a)'da S spininin, komşusu olan I spininin bir spin durumuna bağlı olarak nasıl farklı bir yerel alanı hissettiğini göstermektedir. Eğer S, tek bir I komşusuna sahipse o zaman S'nin rezonansı ikiye yarılr(Şekil 2.1.4.2.b).



Şekil 2.1.4.2. (a) S spininin, komşusu I spininin  $\alpha$  ve  $\beta$  durumlarına bağlı olarak gördüğü alanın yönü (b) S'nin rezonansının ikiye yarılması

Spin-spin çiftlenimi, I spininin, I ve S arasındaki kimyasal bağlardaki elektronlarla olan bir zayıf etkileşmeye sahip olması ve bu elektronların sırayla S spini ile zayıf olarak etkileşmeleri nedeniyle ortaya çıkar. Bu etkileşme; uygulanan magnetik alandan bağımsızdır ve Hertz (Hz) cinsinden ölçülen  $J$  simgesi ile verilir. Buna göre S spininin, I ve S spinleri arasındaki  $J$  çiftlenimi yüzünden gördüğü yerel magnetik alan

$$2\pi I I_z \quad (2.1.4.3)$$

dir. Bunun anlamı,  $\alpha$  - durumundaki I spinine bağlanmış S spininin  $\pi J$  alanını,  $\beta$  - durumundaki I spinine bağlanmış S spininin ise  $-\pi J$  (açısal frekans biçiminde) alanını gördüğüdür.  $J$  çiftlenimi nedeniyle I-S spin sistemi için enerji,

$$E_J = 2\pi I I_z S_z \quad (2.1.4.5)$$

dir. Buradan  $m_S$  durumundaki bir S spininin enerjisinin,

$$E(m_S) = -\gamma B_0(1-\sigma)S_z + 2\pi I I_z S_z = [-\gamma B_0(1-\sigma) + 2\pi J m_I] m_S \quad (2.1.4.6)$$



oluşturduğu alan şiddeti, dış alanla orantılıdır, yönü ise zıttır. Bu durumda, çekirdek üzerine etkiyen toplam alan,

$$\vec{B} = \vec{B}_0 - \sigma \vec{B}_0 = (1 - \sigma) \vec{B}_0 \quad (2.1.4.7)$$

olur. Burada  $\sigma$  “ ekranlama sabiti ya da kimyasal kayma sabiti ” denilen küçük boyutsuz bir sabittir ve ppm ( parts per million ) cinsinden ifade edilir ( 1ppm=10<sup>-6</sup>). Bu durumda çekirdeğin enerji operatörü,

$$H_{CS} = -\gamma(1 - \sigma)B_0 I_z \quad (2.1.4.8)$$

biçiminde olur.  $H_{CS}$  operatörüne kimyasal kayma operatörü denir.

### 2.1.5. Yoğunluk Matrisi

Kuantum mekaniğinin 1. postülasına göre, bir sistemin belli bir t anındaki durumu  $\psi(\vec{r}, t)$  dalga fonksiyonu ile verilir. Çok sayıda spinden oluşan bir sistemin tanımlanması için, bir istatistiksel topluluğun tümü üzerinden ortalama özelliğini veren yoğunluk matrisi kullanılır. Buna göre, yoğunluk matrisi, tek bir  $\psi$  dalga fonksiyonu ile tanımlanabilen bir ‘saf durum’ için göz önüne alınır ve Hilbert uzayındaki taban  $u_n$  vektörleri cinsinde

$$\psi = \sum_n c_n u_n \quad (2.1.5.1)$$

biçiminde ortonormal seriye açılabilir. Öte yandan A, keyfi bir gözlenebilirini temsil eden bir operatörün beklenen değeri

$$\langle A \rangle = \sum_{n,m} c_m c_n^* A_{nm} \quad (2.1.5.2)$$

biçiminde yazılabilir. Burada  $A_{nm}$ ,

$$A_{nm} = \langle u_n | A | u_m \rangle \quad (2.1.5.3)$$

biçiminde  $A$ 'nın matris elemanıdır. Öte yandan, bir ÇMR tüpü içindeki örnek gibi bir makroskobik sistem, tek bir 'saf durum' dalga fonksiyonu ile tanımlanamaz. Bu nedenle, istatistik mekanikte olduğu gibi topluluk üzerinden ortalama alarak,

$$\overline{\langle A \rangle} = \sum_{n,m} \overline{c_m c_n^*} A_{nm} \quad (2.1.5.4)$$

elde ederiz.  $A$  keyfi olduğundan, herhangi bir fiziksel operatör için topluluk ortalaması olarak,

$$\rho_{mn} = \overline{c_m c_n^*} \quad (2.1.5.5)$$

niceliği belirlenir.  $\rho_{mn}$  matris elemanları olan  $\rho$  operatörüne, yoğunluk matris operatörü denir. Bu operatör, sistem hakkında geçerli tüm bilgileri içerir. Denklem (2.1.5.4)'ü  $\rho$  cinsinden ifade edersek,

$$\overline{\langle A \rangle} = \sum_{n,m} \rho_{nm} A_{nm} \quad (2.1.5.6)$$

olur. Sağ taraf bir matris çarpımı olarak yorumlanır. Bu nedenle,

$$\overline{\langle A \rangle} = \sum_m (\rho A)_{nm} \quad (2.1.5.7)$$

yazılabilir. Bir matrisin köşegen elemanları toplamına matrisin izi denir ve

$$\text{İz}B = \sum_m B_{mm} \quad (2.1.5.8)$$

olarak yazılabilir. O halde Denklem (2.1.5.7),

$$\overline{\langle A \rangle} = \text{İz}(\rho A) \quad (2.1.5.9)$$

biçiminde gösterilebilir. Bir gözlenebilirin ortalama değerini bulmak için yoğunluk matrisi bulunur, bununla gözlenebilire karşılık gelen matris çarpılır ve çarpımın izi alınır. Bu biçimde tanımlanan yoğunluk matrisi  $\rho$ , Hermityen bir operatördür yani,

$$\rho_{mn} = \rho_{nm}^* \quad (2.1.5.10)$$

dir ve  $H$  sistemin hamiltoniyeni olmak üzere  $\rho$ 'nun zamanla gelişimi,

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho] \quad (2.1.5.11)$$

denklemleri ile verilir.  $\rho$ ,  $H$  ile komütatif ise  $\rho$ 'nun sabit olduğunu görebiliriz. Bu denkleme Liouville denklemleri denir.

## 2.2. Çarpım Operatör Kuramı

Temel ÇMR deneylerinin tanımlanması için vektör modeli adı verilen ve Bloch denklemleri ile mıknatıslanma vektörünün hareketinin tanımlandığı bir yöntem kullanılmakta idi. Ancak bu yöntem, çiftlenimli spin sistemlerine uygulanabilir olmaktan uzaktı. Özellikle, iki boyutlu ÇMR'nin ortaya çıkması ile deneylerin büyük çoğunluğu çiftlenimli spin sistemleri ile ilgili olmuştur. Bu nedenle, çok-puslu deneyler altında incelenen böyle sistemlerin davranışını tanımlamak üzere yeni bir yöntem gereksinim duyulmuştur. Bu yöntem, kuantum mekaniksel temellere dayalı ve çarpım operatör formalizmi denilen bir yöntem olmuştur.

Çarpım operatör kuramına göre, yoğunluk operatörü, Liouville operatör uzayını geren  $B_s$  taban operatörleri cinsinden tam takım seriyeye,

$$\sigma(t) = \sum_s b_s(t) B_s \quad (2.2.1)$$

olarak açılabilir (Fano, 1957).

Buna göre  $I_k=1/2$  ( $k=1, 2, 3, \dots$ ) spinli sistemler için  $B_s$  taban operatörleri matrislerinin direkt çarpımıyla

$$B_s = 2^{(q-1)} \prod_{k=1}^n (I_{k_v})^{a_{sk}} \quad (2.2.2)$$

olarak tanımlanır ( Ernst ve ort., 1987). Burada n; toplam spin sayısı, k; spinin indisi, v; x, y, z eksenleri, q; direkt matris çarpımında yer alan çarpım operatörlerin sayısı ve  $a_{sk}$ ; verilen çarpım operatöründe bulunan spinleri tanımlar. Örneğin, q spin için  $a_{sk}=1$  dir ve geriye kalan n-q spin için  $a_{sk}=0$  dır.

Genelleştirilerek, n spinli ( $I=1/2$ ) sistemler için  $B_s$  taban takımı,  $4^n$  tane  $B_s$  işlemcisinden oluştuğunu söyleyebiliriz. Tek 1/2 spin sistemi için çarpım operatörler,  $E, I_x, I_y, I_z$  iken, zayıf çiftlenimli IS ( $I=1/2, S=1/2$ ) spin sistemi için 16 tane çarpım işlemcisi olacaktır. Bunlar Denklem (2.2.2)'den yararlanılarak, Çizelge (2.2.1)'deki gibi gösterilebilir.

Çizelge 2.2.1. IS ( $I=1/2, S=1/2$ ) spin sistemi için çarpım operatörleri

q=0	$1/2E$
q=1	$I_x, I_y, I_z, S_x, S_y, S_z$
q=2	$2I_xS_x, 2I_xS_y, 2I_xS_z, 2I_yS_x, 2I_yS_y, 2I_yS_z, 2I_zS_x, 2I_zS_y, 2I_zS_z$

Çarpım operatör kuramında, çeşitli hamiltoniyenlerin çarpım operatörleri üzerine etkisi, Hausdorff eşitliği denen ve

$$\exp(-iHt)A\exp(iHt) = A - (it)[H, A] + \frac{(it)^2}{2!}[H, [H, A]] - \frac{(it)^3}{3!}[H, [H, [H, A]]] + \dots \quad (2.2.3)$$

olarak verilen bağıntıdan yararlanılarak hesaplanır (Homans, 1992).

### 2.2.1. Radyofrekans Pulslarının Çarpım İşlemciler Üzerine Etkisi

x- ekseni boyunca uygulanan bir puls süresince zamanla değişmeyen  $H_1 = \omega_1 I_x$  radyofrekans hamiltoniyeni için Hausdorff eşitliği kullanılarak,

$$\exp(-iH_1t)I_z\exp(iH_1t) = \exp(-i\omega_1t)I_z\exp(i\omega_1t)$$

$$\begin{aligned}
&= \exp(-i\theta)I_z \exp(i\theta) \\
&= I_z - (i\theta)[I_x, I_z] + \frac{(i\theta)^2}{2!}[I_x, [I_x, I_z]] - \frac{(i\theta)^3}{3!}[I_x, [I_x, [I_x, I_z]]] + \dots \\
&= I_z - \theta I_y - \frac{\theta^2}{2!}I_z + \frac{\theta^3}{3!}I_y + \dots \\
&= I_z \left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \dots\right) - I_y \left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots\right) \tag{2.2.1.1}
\end{aligned}$$

bulunur. Kısa gösterimde bu eşitlik,

$$I_z \xrightarrow{H_1 t} I_z \cos(\theta) - I_y \sin(\theta) \tag{2.2.1.2}$$

biçiminde yazılır. Süreç,  $I_x$  ve  $I_y$  çarpım operatörleri için uygulandığında,

$$I_x \xrightarrow{H_1 t} I_x \tag{2.2.1.3}$$

$$I_y \xrightarrow{H_1 t} I_y \cos(\theta) + I_z \sin(\theta) \tag{2.2.1.4}$$

elde edilir. S=1/2 ve 3/2 için r.f. hamiltoniyenin çarpım işlemciler üzerine etkisi aynıdır (Çizelge 2.2.1.1).

Çizelge 2.2.1.1. Radyofrekans hamiltoniyenin çarpım operatörleri üzerine etkisi

Çarpım İşlemcileri	Puls uygulandıktan sonra çarpım işlemcileri $\sigma' = \exp(-i\theta P)\sigma \exp(i\theta P)$		
	$P = I_x$	$P = I_y$	$P = I_z$
$I_x$	$I_x$	$I_x \cos(\theta) - I_z \sin(\theta)$	$I_x \cos(\theta) + I_y \sin(\theta)$
$I_y$	$I_y \cos(\theta) + I_z \sin(\theta)$	$I_y$	$I_y \cos(\theta) - I_x \sin(\theta)$
$I_z$	$I_z \cos(\theta) - I_y \sin(\theta)$	$I_z \cos(\theta) + I_x \sin(\theta)$	$I_z$

### 2.2.2. Kimyasal Kayma Hamiltoniyenin Çarpım İşlemciler Üzerine Etkisi

Yine Hausdorff eşitliği kullanılarak kimyasal kayma hamiltoniyeni  $H_{cs} = \Omega_1 I_z$  'nin, çarpım işlemcilerine etkisi elde edilebilir. Örneğin  $I_x$  çarpım operatörü için bu etki,

$$\begin{aligned}
& \exp(-iH_{cs}t)I_x \exp(iH_{cs}t) = \exp(-i\Omega_1 I_z t)I_x \exp(i\Omega_1 I_z t) \\
& = I_x - (i\Omega_1 t)[I_z, I_x] + \frac{(i\Omega_1 t)^2}{2!}[I_z, [I_z, I_x]] - \frac{(i\Omega_1 t)^3}{3!}[I_z, [I_z, [I_z, I_x]]] + \dots \\
& = I_x - (i\Omega_1 t)iI_y + \frac{(i\Omega_1 t)^2}{2!}I_x - \frac{(i\Omega_1 t)^3}{3!}iI_y + \dots \\
& = I_x + (\Omega_1 t)I_y - \frac{(\Omega_1 t)^2}{2!}I_x - \frac{(\Omega_1 t)^3}{3!}I_y + \dots \\
& = I_x \left( 1 - \frac{(\Omega_1 t)^2}{2!} + \dots \right) + I_y \left( (\Omega_1 t) - \frac{(\Omega_1 t)^3}{3!} + \dots \right) \\
& = I_x \cos(\Omega_1 t) + I_y \sin(\Omega_1 t) \tag{2.2.2.1}
\end{aligned}$$

biçimindedir. Benzer olarak,  $I_y$  ve  $I_z$  çarpım operatörleri için,

$$I_y \xrightarrow{\Omega_1 I_z t} I_y \cos(\Omega_1 t) - I_x \sin(\Omega_1 t) \tag{2.2.2.2}$$

$$I_z \xrightarrow{\Omega_1 I_z t} I_z \tag{2.2.2.3}$$

olmaktadır.

### 2.2.3. Zayıf Çiftlenimli Spin-Spin Çiftlenim Hamiltoniyeninın Çarpım İşlemciler Üzerine Etkisi

Zayıf çiftlenimli IS spin sisteminin, spin-spin çiftlenim hamiltoniyeni  $H_J = 2\pi J I_z S_z$ 'nin  $I_x$  çarpım operatörü üzerine etkisi, yine Hausdorff eşitliği kullanılarak,

$$\begin{aligned}
& \exp(-iH_J t) I_x \exp(iH_J t) = \exp(-i2\pi J I_z S_z t) I_x \exp(i2\pi J I_z S_z t) \\
& = I_x - (it)(2\pi J S_z) [I_z, I_x] + \frac{(it)^2}{2!} (2\pi J S_z)^2 [I_z, [I_z, I_x]] \\
& \quad - \frac{(it)^3}{3!} (2\pi J S_z)^3 [I_z, [I_z, [I_z, I_x]]] + \dots \\
& = I_x + (2\pi J t) I_y S_z - \frac{(2\pi J t)^2}{2!} I_x S_z^2 - \frac{(2\pi J t)^3}{3!} I_y S_z^3 + \dots \\
& = I_x \left( 1 - \frac{1}{4} \frac{(2\pi J t)^2}{2!} + \dots \right) + I_y S_z \left( (2\pi J t) - \frac{2}{8} \frac{(2\pi J t)^3}{3!} + \dots \right) \\
& = I_x \cos(\pi J t) + 2 I_y S_z \sin(\pi J t) \tag{2.2.3.1}
\end{aligned}$$

elde edilir. Benzer işlemlerle, kısa gösterimde aşağıdaki sonuçlar elde edilir (Sorensen and Ernst, 1983).

$$I_x \xrightarrow{2\pi J I_z S_z} I_x \cos(\pi J t) + 2 I_y S_z \sin(\pi J t) \tag{2.2.3.2}$$

$$I_y \xrightarrow{2\pi J I_z S_z} I_y \cos(\pi J t) - 2 I_x S_z \sin(\pi J t) \tag{2.2.3.3}$$

### 2.3. Kuantum Bilgisayarları

Bu bölümde, çekirdek magnetik rezonans bilgisayarlarının temelini oluşturan kuantum bilgisayarlarının ve bazı mantık geçitlerinin tanıtılması uygun olacaktır.

#### 2.3.1. Bit ve Kübit

Bugünün bilgisayarlarının temeli, küçük mantık geçitlerinden oluşmuş elektronik devrelere dayanır. George Boole'un ortaya koyduğu cebir ile elektrik devrelerinin mantıksal yapısının ilişkisini 1937'de Claude Shannon belirlemiştir. Bu cebir kurallarına göre işleyen mantık geçitlerinin 1 ve 0 (doğru-yanlış) değerlerini alabilen girişleri ve çıkışları vardır. İkili sistemin bilgisayar programlarının saklanmasında kullanılması fikri ise 1940'larda matematikçi John von Neumann'dan gelmiştir.

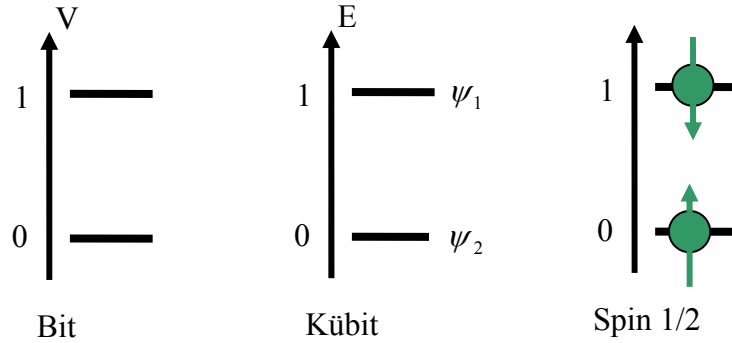
Bilgisayarlarda saklanabilecek en küçük veri parçası "binary digit" in kısaltılmışı olan "bit" dir. Bir bit, sıfır "0" ve bir "1" olmak üzere iki değer alabilir. Klasik bilgisayarlarda bilgi bir "bit'ler sicimi" gibi kodlanır ( Berman ve ort., 1998).

Kuantum dünyasına baktığımız zaman, Werner Heisenberg'in ortaya koyduğu "belirsizlik ilkesi" ile karşılaşırız. Bu ilkeye göre; bir parçacığın durumu, hiçbir zaman kesin bir değerle belirlenemez. Konumundaki belirsizlik ile, hızındaki belirsizliğin çarpımı her zaman sıfırdan farklı olmak zorundadır. Parçacığın hızını belirlemek için yapılan gözlem, parçacığın konumunu değiştirir. Örneğin bir protonun çevresinde dolaşan elektronun belli bir anda nerede bulunduğunu belirlemek mümkün değildir.

Erwin Shrödinger, parçacıkların konumunun tek bir değer yerine tüm değişkenlerin olası durumlarını kapsayan bir dalga fonksiyonu ile açıklanabileceğini kanıtladı. Kuantum mekaniğinin birinci postülasına göre, bir fiziksel sistemin belirli bir t anındaki durumu,  $\Psi(\vec{r}, t)$  dalga fonksiyonu ile belirlenir. Schrödinger denkleminin çözümleri, dalgaların üst üste binme (süperpozisyon) özelliğine sahip olurlar.  $\psi_1$  ve  $\psi_2$  lineer ve homojen bir diferansiyel denklemin çözümleri ise,  $\psi_1 + \psi_2$  çizgisel birleşimi de, aynı denklemin çözümüdür.

Kuantum hesaplamada kullanılan temel bilgi değerleri, genel anlamda iki duruma sahip kuantum sisteminin bu durumlarının toplamı biçiminde ifade edilir. Bir proton ve bir elektrondan oluşan kuantum sisteminin, “taban durum” ve “uyarılmış durum” gibi iki farklı durumu mantıksal açıdan ‘0’ ve ‘1’ olarak etiketlenip kullanılabilir. Bu noktada böyle bir sistemin bilgisini taşıyan “kuantum bit” yani “kübit” kavramı karşımıza çıkar. Kübit için iki mümkün durum,  $|0\rangle$  ve  $|1\rangle$  durumlarıdır. Bu durumlar iki boyutlu Hilbert uzayında ortonormal baz oluştururlar. Kuantum mekaniğine göre,  $|0\rangle$  ve  $|1\rangle$  olarak etiketlenebilecek iki farklı duruma sahip kuantum sistemi, herhangi bir anda bu durumlardan birinde bulunabileceği gibi bunların çizgisel birleşimi, yani,  $(|0\rangle \pm |1\rangle)$ , olan bir üst durumda da bulunabilir. Dolayısıyla kübit, bittten farklı olarak  $|0\rangle$  ve  $|1\rangle$  durumlarının çizgisel birleşimi olan bir durumu da temsil edebilir.

Durgun dış magnetik alan içerisindeki 1/2 spinli çekirdeğin iki enerji düzeyi tek kübit olarak değerlendirilir. Zeeman enerji düzeyleri olarak adlandırılan bu iki enerji düzeyinden düşük enerjili düzey  $|0\rangle$ , yüksek enerjili düzey  $|1\rangle$  olarak etiketlenir (Şekil 2.3.1.1).



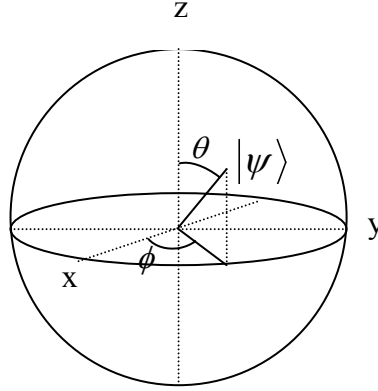
Şekil 2.3.1.1. Bit ve Kübit

Bu sistemin dalga fonksiyonu,

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \quad (2.3.1.1)$$

biçiminde gösterilir.  $c_0$  ve  $c_1$ , karmaşık sayılardır ve durumların genliğini ifade eder.  $|c_0|^2$ , sistemin  $|0\rangle$  durumunda bulunma olasılığı ve  $|c_1|^2$ , sistemin  $|1\rangle$  durumunda bulunma olasılığı olmak üzere  $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$  dir.

Kübit durumlarının birer nokta olarak üzerinde temsil edildiği küre, Bloch küresi olarak adlandırılır (Şekil 2.3.1.2). Bloch küresinin matematiksel karşılığı, Hilbert uzayıdır. Hilbert uzayı; sonsuz boyutlu, karmaşık, çizgisel, bir skaler çarpımın tanımlanabildiği ve normu sonlu fonksiyonların oluşturduğu uzaydır. Kuantum sisteminin, fiziksel durumunu temsil eden dalga fonksiyonları bu uzayda bir nokta ile gösterilebilir (Vandersypen vd., 2002).



Şekil 2.3.1.2. Bloch Küresi

İki kübit durumu için, her bir çekirdeğe ait  $\psi_1$  ve  $\psi_2$  dalga fonksiyonlarının,  $|0\rangle$  ve  $|1\rangle$  durumlarının çizgisel birleşimi biçiminde ifadeleri yazılır. Yani,

$$|\psi_1\rangle = a_1|0\rangle + b_1|1\rangle \quad \text{ve} \quad |\psi_2\rangle = a_2|0\rangle + b_2|1\rangle \quad (2.3.1.2)$$

olur. İki kübit durumunu temsil eden dalga fonksiyonu,  $|\psi_1\rangle$  ve  $|\psi_2\rangle$ 'nin direkt çarpımı ile tanımlanır. Yani,

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \quad (2.3.1.3)$$

dir. Burada Denklem (2.3.1.2)'deki ifadeler yerleştirilirse,

$$|\psi\rangle = a_1a_2|0\rangle \otimes |0\rangle + a_1b_2|0\rangle \otimes |1\rangle + b_1a_2|1\rangle \otimes |0\rangle + b_1b_2|1\rangle \otimes |1\rangle \quad (2.3.1.4)$$

olur.

Bu ifadedeki direkt çarpımlar, genel olarak aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\begin{aligned}
|0\rangle \otimes |0\rangle &= |00\rangle \\
|0\rangle \otimes |1\rangle &= |01\rangle \\
|1\rangle \otimes |0\rangle &= |10\rangle \\
|1\rangle \otimes |1\rangle &= |11\rangle
\end{aligned} \tag{2.3.1.5}$$

Buna göre (2.3.1.4) ifadesi,

$$|\psi\rangle = a_1 a_2 |00\rangle + a_1 b_2 |01\rangle + b_1 a_2 |10\rangle + b_1 b_2 |11\rangle \tag{2.3.1.6}$$

olur. Birbirlerinden bağımsız olarak seçilen iki kübite ait durumların, çizgisel birleşimindeki sabitlerin çarpımı tek bir sabitle,

$$|\psi\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle \tag{2.3.1.7}$$

biçiminde gösterilebilir. Bu durumun ondalık gösterimi ise,

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + c_3|3\rangle \tag{2.3.1.8}$$

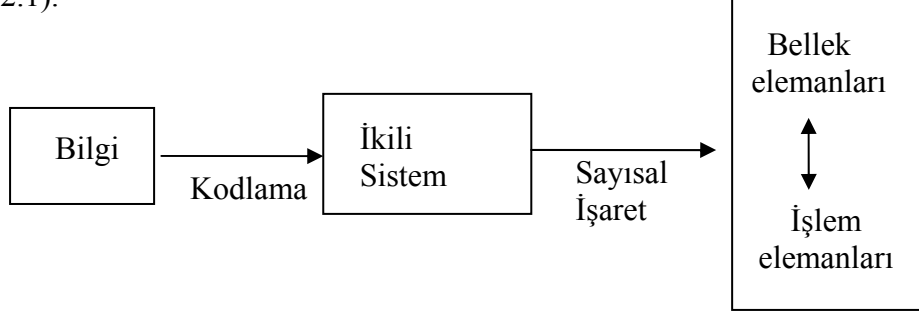
şeklinde olur. Yani, n sayıda kübit için  $2^n$  sayıda durumun çizgisel birleşimi sistemi temsil eder. Bunu genelleştirerek,

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{2^n-1} c_k |k\rangle \tag{2.3.1.9}$$

biçiminde yazabiliriz. Başka bir ifadeyle, n sayıda kübite ait saf durumların tanımlanması için  $2^n-1$  sayıda karmaşık sayıya ihtiyaç vardır.

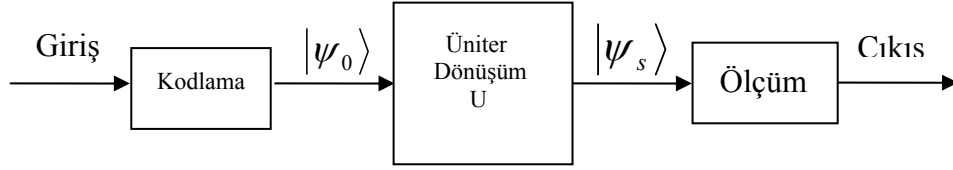
### 2.3.2. Mantık Geçitleri

Bilgi, bilgisayar diline çevrildikten sonra bilgisayarda saklanır ya da işlenir (Şekil 2.3.2.1).



Şekil 2.3.2.1. Bilginin İşlem ve Bellek Elemanlarına İletilmesi

Bilginin işlenmesi, basit ikili sistem elemanları olan mantık geçitleri ile yapılır. Kuantum bilgisayarlarında girişi yapılan bilgi, kuantum mantık geçitleri ile işlenir (Şekil 2.3.2.2).



Şekil 2.3.2.2. Kuantum Bilgisayarın İşleyişi

Kuantum mantık geçitlerine, üniter dönüşüm operatörleri karşılık gelir. Üniter dönüşüm operatörü,  $\psi(t)$  dalga fonksiyonu ile tanımlanan sistemin,  $\psi(0)$  başlangıç durumundan  $\psi(t)$  son durumuna zamanla gelişimini tanımlar. Dalga fonksiyonunun zamanla değişimi, zamana bağlı Schrödinger dalga denklemiyle, yani,

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H\psi \quad (2.3.2.1)$$

ile verilir. Schrödinger temsilinde, yani,  $H$  operatörünün zamandan bağımsız olduğu temsilde, Denklem (2.3.2.1)'in çözümü,

$$\psi(t) = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)\psi(0) \quad (2.3.2.2)$$

dir. Buradan, üniter dönüşüm operatörü  $U(t)$  için

$$\psi(t) = U(t)\psi(0), \quad U(t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) \quad (2.3.2.3)$$

yazılabilir.

Bilgiye ait değişkenlerin alabileceği değerlerle mantık geçidinin yaptığı işlemin sonucu arasındaki ilişki, doğruluk çizelgesinde gösterilir. Doğruluk çizelgesindeki durum sayısı değişken sayısına bağlıdır. Değişken sayısı  $n$  ise, durum sayısı  $2^n$  olur. Bazı temel mantık geçitleri ve doğruluk çizelgeleri Çizelge 2.3.2.1' de gösterilmiştir.

Çizelge 2.3.2.1. Temel mantık geçitleri

İsim	Cebirsel Fonksiyon	Doğruluk Çizelgesi															
<b>VE (AND)</b>	$F = x \cdot y$	<table border="1"> <thead> <tr> <th>x</th> <th>y</th> <th>F</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>0</td> <td>1</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>1</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> </tbody> </table>	x	y	F	0	0	0	0	1	0	1	0	0	1	1	1
x	y	F															
0	0	0															
0	1	0															
1	0	0															
1	1	1															
<b>VEYA (OR)</b>	$F = x + y$	<table border="1"> <thead> <tr> <th>x</th> <th>y</th> <th>F</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>0</td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td>1</td> <td>0</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> </tbody> </table>	x	y	F	0	0	0	0	1	1	1	0	1	1	1	1
x	y	F															
0	0	0															
0	1	1															
1	0	1															
1	1	1															
<b>DEĞİL (NOT)</b>	$F = \bar{x}$	<table border="1"> <thead> <tr> <th>x</th> <th>F</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>0</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td>1</td> <td>0</td> </tr> </tbody> </table>	x	F	0	1	1	0									
x	F																
0	1																
1	0																

#### 2.4. ÇMR Bilgisayarları

Kesim 2.1.4.1’de açıklandığı gibi durgun dış magnetik alandaki  $I=1/2$  spinli bir çekirdeğin iki Zeeman enerji düzeyi vardır. Böyle bir sistem, tek kübit olarak değerlendirilir ve düşük enerjili düzey  $|0\rangle$ , yüksek enerjili düzey  $|1\rangle$  olarak etiketlenir. Buna göre, tek kübit durumları,

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.4.1)$$

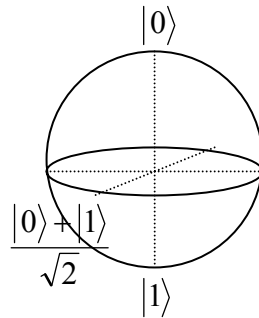
biçiminde sütun matrislerle gösterilebilir. Sistem,  $|0\rangle$  veya  $|1\rangle$  durumunda bulunabileceği gibi, bu iki durumun çizgisel birleşimi olan  $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$  dalga fonksiyonu ile temsil edilen bir üst durumda da bulunabilir. Öte yandan, Bloch küresinde (Şekil 2.3.1.2),  $\theta$  ve  $\phi$  serbestlik derecelerine bağlı olarak gösterilebilen bu dalga fonksiyonu,

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \quad (2.4.2)$$

biçiminde de yazılabilir.  $\theta=90^\circ$  ve  $\phi=0$  için bu ifade,

$$\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.4.3)$$

olur ve Bloch küresinde Şekil 2.4.1’deki gibi gösterilir (Vandersypen vd., 2002).



Şekil 2.4.1. Bloch Küresi Üzerinde Durumlar

$|0\rangle$  ve  $|1\rangle$  durumlarının çizgisel birleşimi olan  $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$  dalga fonksiyonu, Denklem (2.4.1) ile verilen ifadeler göz önüne alındığında,

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} \quad (2.4.4)$$

sütun matrisi ile gösterilebilir. ÇMR bilgisayarları, tek spin durumundan çok Kesim 2.1.5'te belirtilen ve spin topluluğunu tanımlayan yoğunluk matrisi cinsinden tanımlanır.  $|\psi\rangle$  matrisinin transpozisinin karmaşık eşleniği  $\langle\psi|$  olmak üzere, yoğunluk matrisi,

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} c_0^*c_0 & c_1^*c_0 \\ c_0^*c_1 & c_1^*c_1 \end{pmatrix} \quad (2.4.5)$$

olur. Buna göre,  $|0\rangle$  durumuna karşılık gelen yoğunluk matrisi,

$$\rho = |0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.4.6)$$

biçiminde ve  $|1\rangle$  durumuna karşılık gelen yoğunluk matrisi de,

$$\rho = |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.4.7)$$

olarak ifade edilir. Öte yandan,  $\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$  durumuna karşılık gelen yoğunluk matrisi ise,

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (2.4.8)$$

dir ( Jones vd., 1998).

Tek spin sistemi, yani, tek kübit için kuantum durumları arasındaki ilişki basitken, iki ve daha çok kübit için bu ilişki karmaşık hale gelmektedir. Örneğin iki kübit için  $|00\rangle$  durumuna karşılık gelen yoğunluk matrisi,

$$|00\rangle\langle 00| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.4.9)$$

biçimindedir. Ancak, bu matris sıcaklıkça dengedeki IS ( $I=1/2$ ,  $S=1/2$ ) spin sistemini tanımlayan

$$I_z + S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.4.10)$$

yoğunluk matrisinden farklıdır. Bu problemin üstesinden gelmenin bir yolu olarak iki spinli sistemlerde, spin durumlarının içinden dört durum seçilir (Gershenfeld ve Chuang, 1997). Bu seçim yapılırken,  $|00\rangle\langle 00|$  yoğunluk matrisine karşılık gelen nüfusa sahip durumlar belirlenir. Bu durumlar, sanki-iki kübit sistemi gibi kullanılır (Jones vd., 1998). Buna göre iki kübit için durumlar,

$$\begin{aligned} |00\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & |01\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |10\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & |11\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

biçiminde tanımlanır.

### 2.4.1. Tek Kübit Geçidi : DEĞİL

DEĞİL (NOT) geçidi, tek kübit kuantum sisteminde bir mantık geçidi olarak kullanılır. Bu geçit, Hilbert uzayında bir dönmeye karşılık gelir. Bu dönme, sisteme r.f. alanı uygulanarak başarılır. Örneğin,  $180^\circ$ 'lik x- pulsü, DEĞİL geçidine karşılık gelir. Klasik bilgisayarlar için de geçerli olan DEĞİL geçidinin tek kübit durumlarına uygulanması sonucu,

$$\begin{aligned} |0\rangle &\xrightarrow{D} |1\rangle \\ |1\rangle &\xrightarrow{D} |0\rangle \end{aligned} \quad (2.4.1.1)$$

elde edilir. Matris gösterimi ise,

$$\text{---} \boxed{D} \text{---} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.4.1.2)$$

biçimindedir (Jones ve vd., 1998).

### 2.4.2. İki Kübit Geçidi : DENETİMLİ-DEĞİL

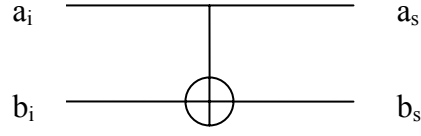
Temel iki kübit geçidi Denetimli-Değil (ya da kısaca CN)'dir. Denetimli-Değil geçidi,

$$CN = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 10| \quad (2.4.2.1)$$

operatörü olarak tanımlanır. Denetimli-Değil geçidi için iki giriş ve iki çıkış vardır. Bu geçit, işlem yaptığı iki kübitten birincisini denetim kübiti (a), diğerini hedef kübiti (b) olarak değerlendirir ve denetim kübitinin girişteki durumlarına göre, hedef kübitinin çıkışını belirler. Denetim kübiti  $|0\rangle$  durumunda ise, denetim ve hedef kübitleri, girişteki durumlarını korurlar. Denetim kübiti  $|1\rangle$  durumunda ise, denetim kübiti girişteki durumunu korurken, hedef kübitinin çıkışı girişteki durumunun 'Değili' olur. Bu geçide ait doğruluk çizelgesi aşağıda verilmiştir.

Çizelge 2.4.2.1. Denetimli-Değil Geçidi için Doğruluk Çizelgesi ve Denetimli-Değil Mantık Geçidinin Gösterimi

$a_i$	$b_i$	$a_s$	$b_s$
0	0	0	0
0	1	0	1
1	0	1	1
1	1	1	0



Doğruluk çizelgesinde de görüldüğü gibi,

$$a_s = a_i, \quad b_s = \begin{cases} b_i, & a_i = 0 \text{ ise} \\ \overline{b_i}, & a_i = 1 \text{ ise} \end{cases} \quad (2.4.2.2)$$

olmaktadır. Burada  $a_i$  ve  $b_i$  girişler için  $a_s$  ve  $b_s$  de çıkışlar için kullanılmaktadır. Başka bir ifadeyle, denetim kubitinin giriş değeri “1” ise, hedef kubitinin çıkışı

$$b_s = a_i \oplus b_i \quad (2.4.2.3)$$

olur. Burada kullanılan ‘ $\oplus$ ’ işlemi, klasik bilgisayarlardaki ÖZEL-VEYA (EXCLUSIVE-OR) mantık geçidinin yaptığı işleme karşılık gelmektedir (Çizelge 2.4.2.2).

Çizelge 2.4.2.2. ÖZEL-VEYA Mantık Geçidinin Doğruluk Çizelgesi

$a_i$	$b_i$	$b_s$
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Denetimli-Değil geçidinin matris gösterimi, (2.4.2.1) göz önüne alınarak,

$$CN = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.4.2.4)$$

biçiminde elde edilir.

Öte yandan denetimli-değil mantık geçidi için Pauli spin operatörleri kullanılarak elde edilen bir başka gösterim ise

$$U_{CN} = \exp\left(-i\frac{\pi}{2}S_y\right)\exp\left(-i\frac{\pi}{2}(I_z + S_z)\right)\exp\left(i\frac{\pi}{2}(2I_zS_z)\right)\exp\left(i\frac{\pi}{2}S_y\right) \quad (2.4.2.5)$$

biçiminde verilir (Gershenfeld and Chuang, 1997).

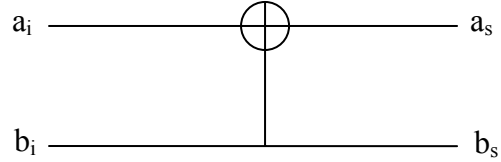
Tanımlanan denetimli-değil mantık geçidi, ilk kübitin yani “a”nın, ikinci kübit “b”yi denetlemesi biçiminde işlem yapmaktadır. Bundan farklı olarak ikinci kübitin birinciyi denetlemesi olarak ta işlem yapan denetimli-değil mantık geçidinden söz edilebilir. Yani hedef kübiti a, denetim kübiti b olmaktadır. Bu ikinci mantık geçidine karşılık gelen operatör,

$$CN_2 = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 11| + |10\rangle\langle 10| + |11\rangle\langle 01| \quad (2.4.2.6)$$

biçimindedir. Bu operatör için doğruluk çizelgesi, Çizelge 2.4.2.3’te verilmektedir.

Çizelge 2.4.2.3.  $CN_2$  Geçidi için Doğruluk Çizelgesi

$a_i$	$b_i$	$a_s$	$b_s$
0	0	0	0
0	1	1	1
1	0	1	0
1	1	0	1



$CN_2$ ’nin yukarıdaki tanımlamaya göre matris temsili ise

$$CN_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.4.2.7)$$

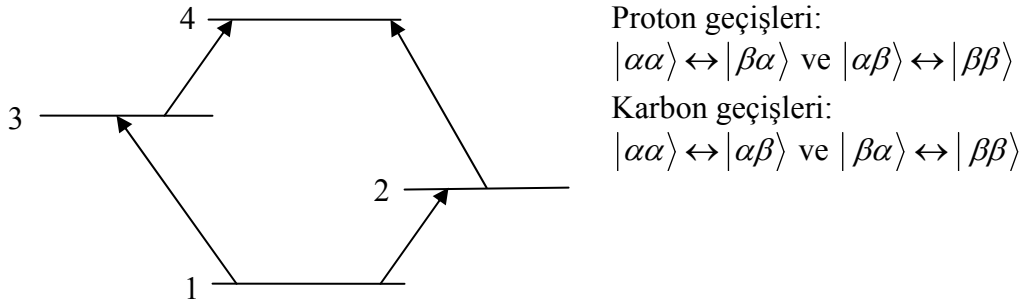
dır.

### 3. MATERYAL VE METOT

#### 3.1. Kutuplanma Aktarımı

Çok-pulslu ÇMR deneylerinde incelenen moleküllerdeki karbonların ve azotların doğrudan gözlenmeleri, iki nedenden dolayı kolay olmamaktadır. Bu nedenler, 1/2 spinli izotopların doğal bolluklarının ve bu çekirdeklerin  $\gamma$  jromagnetik oranlarının düşük olmasıdır. Bu nedenle, kutuplanma aktarımı (polarization transfer ya da kısaca PT) denilen ve duyarlılığı arttırma yöntemi olan bir teknik kullanılarak böyle çekirdeklerin ÇMR spektrumlarını gözlemek mümkündür. Kutuplanma aktarımı, skalar (ya da spin-spin çiftlenim) etkileşmelerin, yüksek  $\gamma$ 'lı bir çekirdeğin yüksek duyarlılığını, daha düşük  $\gamma$ 'lı bir başka çekirdeğe aktarmak için kullanıldığı ve sonuçta, düşük  $\gamma$ 'lı çekirdek için duyarlılığın arttırılmış olduğu bir süreci temel alır. Verilen bir çekirdeğin duyarlılığı, taban durumundaki çekirdeklerin, uyarılmış durumundaki (ya da kutuplanma) çekirdeklere oranına bağlı olduğundan, aktarılan bu yüksek duyarlılığa kutuplanma aktarımı denir.

Kutuplanma aktarımının arttırılması için fiziksel dayanağı tartışmak amacıyla, bir  $^1\text{H}$  ve bir  $^{13}\text{C}$  içeren iki 1/2 spinli çekirdekten oluşmuş bir sistemi göz önüne alalım. Bu iki çekirdeğin, spin-spin çiftlenimli olduklarını ve  $J_{CH}$  sabitine sahip olduklarını düşünelim [ örneğin, metil ( $\text{CH}_3$ ) grubu için  $J_{CH} \cong 125\text{Hz}$  dir]. Bu spin sistemi için enerji düzeyleri ve bu düzeyler arasındaki geçişler Şekil 3.1.1'de gösterilmektedir



Şekil 3.1.1.  $^1\text{H}$  ve bir  $^{13}\text{C}$ 'den oluşan sistem için enerji düzeyleri ve geçişler. Burada proton geçişleri için şiddet  $2\Delta H$  iken  $^{13}\text{C}$  geçişleri için şiddet,  $2\Delta C$  dir

Şekil 3.1.1'de 1, 2, 3 ve 4 enerji düzeyleri, sırasıyla  $|\alpha\alpha\rangle$ ,  $|\alpha\beta\rangle$ ,  $|\beta\alpha\rangle$  ve  $|\beta\beta\rangle$  durumlarına karşılık gelmektedir.

Öte yandan,  $|\alpha\alpha\rangle$  durumundaki nüfus,  $(\Delta H + \Delta C)$ ,  $|\alpha\beta\rangle$  durumundaki  $(\Delta H - \Delta C)$ ,  $|\beta\alpha\rangle$  durumundaki  $(-\Delta H + \Delta C)$  ve son olarak  $|\beta\beta\rangle$  durumundaki nüfus ise  $(-\Delta H - \Delta C)$  ile gösterilebilir. Bu nedenle  $^1\text{H}$  ya da proton geçişi için, yani,  $|\alpha\alpha\rangle \leftrightarrow |\beta\alpha\rangle$  ve  $|\alpha\beta\rangle \leftrightarrow |\beta\beta\rangle$  geçişleri için nüfus farkı,  $(1-3)+(2-4)= 4\Delta H$  iken,  $^{13}\text{C}$  için  $4\Delta C$  dir. Bu geçişlere karşılık gelen  $^1\text{H}$  ve  $^{13}\text{C}$  spektrumlarının şematik çizimleri, Şekil 3.1.2'de verilmektedir. Karbon-13 geçişleri,  $|\alpha\alpha\rangle \leftrightarrow |\alpha\beta\rangle$  ve  $|\beta\alpha\rangle \leftrightarrow |\beta\beta\rangle$  dır.

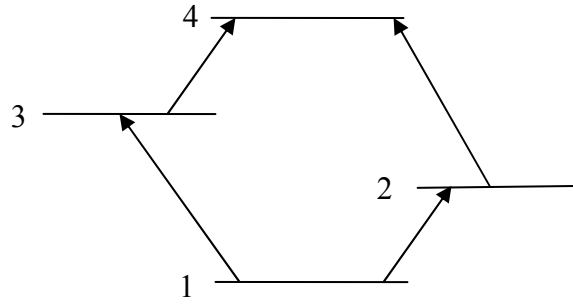


Şekil 3.1.2. Proton ve karbon-13 spektrumları

Şekil 3.1.2'de her iki spektrum da tek bir geçişi kapsamaktadır. Ancak  $J_{CH}$  çiftlenimi nedeniyle ikiye yarıma gözlenmektedir.

Bu durum bize, nüfusun farklı olduğunu ve buradan, bu iki geçişin duyarlılığının yaklaşık eşit, ancak  $\gamma_H \sim 4\gamma_C$  gerçeği göz önüne alındığında  $\Delta H \sim 4\Delta C$  olduğunu önermektedir. Ayrıca bu geçişin göreceli duyarlılığı,  $(\gamma_H/\gamma_C)^3$  çarpanı ile orantılı olduğundan,  $^1\text{H}$  geçişi,  $^{13}\text{C}$  geçişinden yaklaşık 64 kez daha duyarlıdır. Bu hesaplamada, karbonun doğal bolluğu hesaba katılmamıştır.

Eğer  $^{13}\text{C}$  spektrumunu gözlememiz gerekirse, duyarlılığı arttırmak için ne yapmalıyız? Bunun için,  $^1\text{H}$  (proton) geçişlerinden birini (diyelim 2-4 geçişini), tersine çevirirsek, kutuplanma aktarımı yoluyla çok daha büyük bir artış elde edebiliriz. Bu durumu Şekil 3.1.3'teki diyagramı göz önüne alarak açıklayabiliriz.



Proton geçiş şiddeti:

$$(-\Delta H + \Delta C) - (\Delta H + \Delta C) = (-\Delta H - \Delta C) - (\Delta H - \Delta C) = -2\Delta H$$

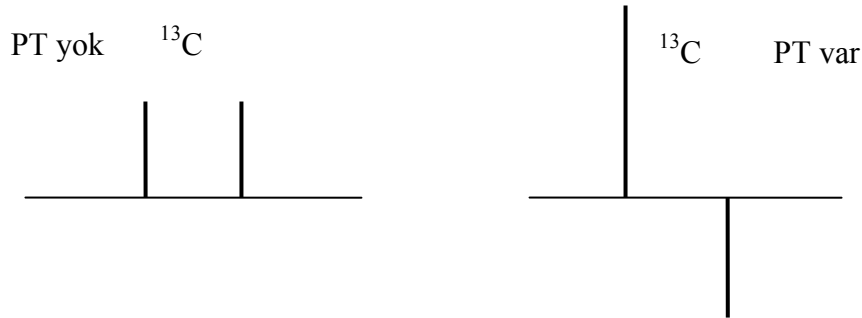
Karbon geçiş şiddeti:

$$(\Delta H + \Delta C) - (-\Delta H - \Delta C) = 2\Delta H + 2\Delta C$$

$$(-\Delta H + \Delta C) - (\Delta H - \Delta C) = -2\Delta H + 2\Delta C$$

Şekil 3.1.3. Kutuplanma aktarımındaki geçiş şiddetleri

Terslenmeyi izleyerek, 1'den 4'e dek enerji düzeylerindeki nüfus, sırasıyla,  $(\Delta H + \Delta C)$ ,  $(-\Delta H - \Delta C)$ ,  $(-\Delta H + \Delta C)$  ve  $(\Delta H - \Delta C)$  olur. İki proton geçişinin şiddeti yine eşit (fakat şimdi  $-2\Delta H$ ) iken, iki karbon geçişi için farklı şiddetli olmaktadır ve dikkate değer ölçüde artmıştır. Şekil 3.1.4'te  $^{13}\text{C}$  spektrumları, kutuplanma aktarımlı ve aktarımlı olmayan durumlar için şematik olarak gösterilmektedir.



Şekil 3.1.4.  $^{13}\text{C}$  için PT'siz ve PT'li spektrumlar

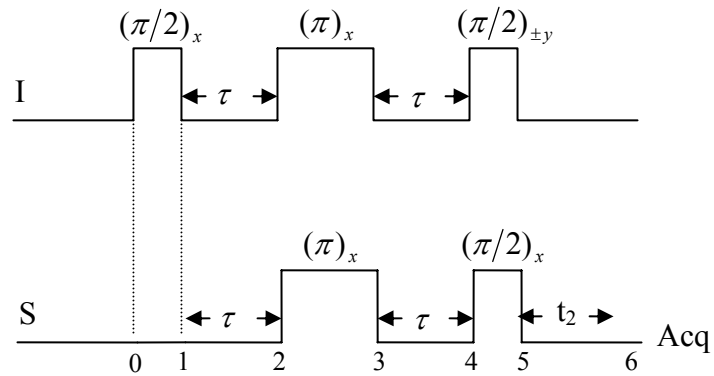
$^{13}\text{C}$  geçişlerindeki artma miktarı,  $\Delta H = 4\Delta C$  almakla hesaplanır. Şekil 3.1.3 ve 3.1.4'de gösterildiği gibi  $1 \leftrightarrow 2$ 'ye karşılık gelen geçiş,  $10\Delta C$  şiddetine sahipken,  $3 \leftrightarrow 4$  geçişi,  $-6\Delta C$  şiddetine sahiptir. Burada 3 noktaya dikkat çekmek uygun olacaktır. İlki, bu artış, mıknatıslanma aktarımıyla elde edilenden (yani, NOE'den) daha iyidir. İkincisi, nüfus farklılıklarını indüklemek için herhangi bir durulma sürecinden sakınmadık. Yani, kutuplanma aktarımı, skalar çiftlenim yoluyla

olmaktadır ve bunu oluşturmak için mıknatıslanma aktarımı ile aynı süreye gereksinim duymamaktadır. Böylece, kutuplanma aktarımı birden bire değil, fakat mıknatıslanma aktarımına göre çok daha hızlı oluşmaktadır. Ve üçüncü olarak, ikiye yarılmış iki spektrum çizgisi, zıt fazlara (biri pozitif, diğeri negatif, fakat her ikisi de soğurucu) ve farklı artırımlara sahiptir (Logan, 1999). Farklı faz ve artırımların türetilmesi, çok sık ve kalabalık spektrumlarda sorun yaratıcıdır. Bu sorunları gidermek için bazı puls dizilerini deneylerde kullanmak yararlı olacaktır. Bu puls dizileri INEPT ve DEPT ÇMR deneylerini oluştururlar.

### 3.2. Zayıf Çiftlenimli IS (I=1/2, S=1/2) Spin Sistemi için INEPT ÇMR Deneyi

Kutuplanma aktarımının, düşük  $\gamma$ 'lı çekirdeklerin sinyallerini arttırmak için deneysel uygulaması, ilk kez Morris ve Freeman tarafından gerçekleştirilmiştir (Morris and Freeman, 1979).

INEPT (Insensitive Nuclei Enhanced by Polarization Transfer) denilen bu puls dizisi Şekil 3.2.1'de verilmektedir. INEPT deneyi ile yüksek jromagnetik oranlı ve yüksek doğal bolluklu protona ( $^1\text{H}=I$ ) bağlı, düşük jromagnetik oranlı ve düşük doğal bolluklu X (=S) çekirdeğinin ÇMR sinyal şiddeti arttırılır.



Şekil 3.2.1. INEPT puls dizisi ( $\tau = 1/4J$ )

Duyarlılık arttırımı,  $\frac{\gamma_H}{\gamma_X}$  ile tanımlanır. Burada  $\gamma_H$ , protonun,  $\gamma_X$  de protona bağlı

düşük doğal bolluklu X çekirdeğinin jromagnetik oranlarıdır. Bu arttırma, X-H spin çiftlenimi yoluyla protondan X çekirdeğine kutuplanma aktarımı ile yapılır.

Öte yandan, bu INEPT puls dizisinin zayıf çiftlenimli bir IS (I=1/2, S=1/2) spin sistemi için çarpım operatör kuramı ile analitik olarak tanımlanması ise ilk kez Sorensen ve Ernst tarafından yapılmıştır (Sorensen and Ernst, 1983).

Buna göre, Kesim 2.2'deki sonuçlardan yararlanarak, Şekil 3.2.1'de numaralarla gösterilen her aşama için yoğunluk matris operatörleri aşağıdaki gibi yazılabilir.

Denge durumundaki yoğunluk operatörü,

$$\sigma_0 = aI_z + bS_z \quad (3.2.1)$$

dir. I spinleri üzerine x- doğrultusunda  $90^\circ$  lik pulsün etkisi ile

$$\sigma_0 \xrightarrow{\left(\frac{\pi}{2}\right)I_x} \sigma_1$$

elde edilir ve

$$\sigma_1 = -aI_y + bS_z \quad (3.2.2)$$

olur.  $\tau = \frac{1}{4J}$  lik ilk gelişme periyodunda spin-spin çiftlenim hamiltoniyenin etkisi,

$$\sigma_1 \xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau} \sigma_2$$

sonucunu verir ve

$$\sigma_2 = -a[I_y C_J - 2I_x S_z S_J] + bS_z \quad (3.2.3)$$

dir. Burada,  $S_J = \text{Sin}(\pi J \tau)$  ve  $C_J = \text{Cos}(\pi J \tau)$  yi ifade eder. Daha sonra, her iki spin üzerine eşzamanlı olarak uygulanan  $180^\circ$  lik pulsların etkisi ise,

$$\sigma_2 \xrightarrow{\pi(I_x + S_x)} \sigma_3$$

dir. Buradan,

$$\sigma_3 = a[I_y C_J - 2I_x S_z S_J] - bS_z, \text{ yani; } \sigma_3 = -\sigma_2 \quad (3.2.4)$$

bulunur. İkinci  $\tau = 1/4J$  lik gelişme periyodunda spin-spin çiftlenim hamiltoniyenin etkisi vardır ve bu etki,

$$\sigma_3 \xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau} \sigma_4$$

sonucunu doğurur ve  $\tau = 1/4J$  için  $\text{Sin}(\pi J \tau) = \text{Sin}\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{\sqrt{2}}{2}$  ve

$\text{Cos}(\pi J \tau) = \text{Cos}\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{\sqrt{2}}{2}$  kullanılarak,

$$\sigma_4 = -2aI_x S_z - bS_z \quad (3.2.5)$$

elde edilir. İkinci  $\tau$  gelişme periyodu sonunda, her iki spin sistemine uygulanan  $90^\circ$  lik r.f. pulslarının etkisi ise,

$$\sigma_4 \xrightarrow{\frac{\pi}{2}(I_y + S_x)} \sigma_5$$

dir ve

$$\sigma_5 = -2aI_z S_y + bS_y \quad (3.2.6)$$

olarak bulunur. INEPT ÇMR deneyinin son aşamasında, I ve S spinleri üzerine kimyasal kayma ve spin-spin çiftlenim hamiltoniyenin etkisi vardır. Kimyasal kayma hamiltoniyeni etkisi,

$$\sigma_5 \xrightarrow{\Omega_S S_z t} \sigma'_6$$

biçimindedir ve

$$\sigma'_6 = -2aI_z (S_y C_S - S_x S_S) + b(S_y C_S - bS_x S_S) \quad (3.2.7)$$

elde edilir. Burada  $C_S = \text{Cos}(\Omega_S t)$ ,  $S_S = \text{Sin}(\Omega_S t)$  dir. Spin-spin çiftlenim hamiltoniyenin etkisi ise,

$$\sigma'_6 \xrightarrow{2\pi I_z S_z t} \sigma_6$$

olur ve

$$\sigma_6 = 2S_y S_S S_J \quad (3.2.8)$$

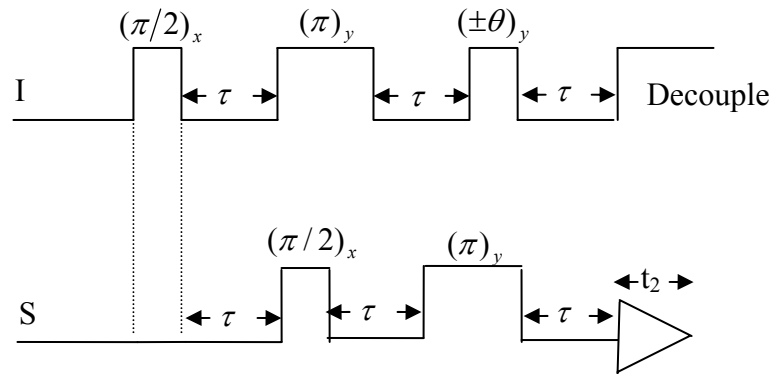
olarak elde edilir. Algılanan sinyalin şiddeti ise

$$M_y \propto \langle S_y \rangle = I_z [S_y, \sigma_6] \quad (3.2.9)$$

ile verilir.

### 3.3. Zayıf Çiftlenimli IS (I=1/2, S=1/2) Spin Sistemi için DEPT ÇMR Deneyi

Kutuplanma aktarımının bir başka deneysel uygulaması ise yine düşük jromagnetik oranlı ve düşük doğal bolluklu çekirdeklerin duyarlılığını arttırmak amacıyla düzenlenen ve DEPT ( **D**istortionless **E**nhancement by **P**olarization **T**ransfer) denilen puls dizisidir. DEPT ÇMR deneyinin puls dizisi Şekil 3.3.1'de verilmektedir ( Doddrell vd., 1982).



Şekil 3.3.1. DEPT puls dizisi ( $\tau = 1/2J$ )

DEPT ÇMR deneyi,  $J_{XI}$  spin çiftlenim sabiti değeri gözlemek istediğimiz çekirdekler için birden daha fazla sayıda varsa, INEPT ÇMR deneyine tercih edilir.

Burada I, duyarlılığı arttıran çekirdek (genellikle  $^1\text{H}$ ) ve X ise gözlenmek istenen ve düşük  $\gamma$ 'lı çekirdektir. Bu nedenle, DEPT deneyi, öteki 1/2 spinli X çekirdeklerinin spektrumları ile birlikte  $^{13}\text{C}$  spektrumlarını elde etmek için en iyi yöntem olmaktadır. Yani, karbon çokluluğuna dayanan  $^{13}\text{C}$  spektrumlarının incelenmesini sağlar.

Öte yandan, zayıf çiftlenimli bir IS (I=1/2, S=1/2) spin sistemi için DEPT puls dizisinin çarpım operatör kuramı kullanılarak, Şekil 3.3.1'de numaralarla gösterilen her adımı için elde edilen yoğunluk matris operatörleri aşağıda verildiği gibidir (Chandrakumar ve Subramanian, 1987).

Denge durumundaki yoğunluk operatörü,

$$\sigma_0 = aS_z + bI_z \quad (3.3.1)$$

dir. I spinleri üzerine x- doğrultusunda  $90^\circ$ 'lik pulsün etkisi ile

$$\sigma_0 \xrightarrow{\left(\frac{\pi}{2}\right)I_x} \sigma_1$$

elde edilir ve

$$\sigma_1 = aS_z - bI_y \quad (3.3.2)$$

olur.  $\tau = \frac{1}{2J}$  lik gelişme periyodunda spin-spin çiftlenim hamiltoniyeninin etkisi,

$$\sigma_1 \xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau} \sigma_2$$

sonucunu verir ve

$$\sigma_2 = 2bI_x S_z \quad (3.3.3)$$

olarak bulunur. Daha sonra, I spini üzerine uygulanan  $180^\circ$  lik y-pulsunun ve S spini üzerine uygulanan  $90^\circ$  lik x-pulsunun etkisi ise,

$$\sigma_2 \xrightarrow{\pi(I_y)} \xrightarrow{\frac{\pi}{2}(S_x)} \sigma_3$$

olur ve

$$\sigma_3 = -2bI_x S_y \quad (3.3.4)$$

elde edilir. İkinci  $\tau = 1/2J$  lik gelişme periyodunda spin-spin çiftlenim hamiltoniyenin etkisi vardır ve bu etki,

$$\sigma_3 \xrightarrow{2\pi I_z S_z \tau} \sigma_4$$

biçiminde gösterilir. Buradan,

$$\sigma_4 = -2bI_x S_y, \text{ yani, } \sigma_4 = \sigma_3 \quad (3.3.5)$$

olarak bulunur. Bundan sonra I spinine ( $\theta$ ) açısı kadar y-pulsu, S spinine  $180^\circ$  lik y-pulsu uygulanır ve bu,

$$\sigma_4 \xrightarrow{\theta(I_y)} \xrightarrow{\pi(S_y)} \sigma_5$$

olarak gösterilir. Uygulama sonucu,

$$\sigma_5 = -2bI_x S_y \cos \theta + 2bI_z S_y \sin \theta \quad (3.3.6)$$

olur. Burada tek kuantum terimini alırsak,

$$\sigma_5 = 2bI_z S_y \sin \theta \quad (3.3.7)$$

elde edilir. Son olarak I ve S spinleri üzerine spin-spin çiftlenim hamiltoniyenin etkisi vardır ve,

$$\sigma_5 \xrightarrow{2\pi I_z S_z t} \sigma_6$$

olur.  $\tau$  süresince, durulmanın ve kimyasal kaymanın etkisi altındaki gelişimin mevcut olmadığı varsayılmaktadır. Uygulama sonucu,

$$\sigma_6 = 2bI_z S_x \sin \theta \quad (3.3.8)$$

olarak elde edilir. Eğer algılama x-ekseni boyunca olursa, algılanan sinyalin şiddeti,

$$M_x \propto \langle S_x \rangle = Iz[S_x, \sigma_6] \quad (3.3.9)$$

ile verilir.

#### 4. ARAŞTIRMA BULGULARI

Bu bölümde, zayıf çiftlenimli IS ( $I=1/2$ ;  $S=1/2$  ve  $3/2$ ) spin sistemleri için, çarpım operatör kuramıyla analitik olarak tanımlanan kutuplanma aktarımlı ÇMR deneylerinden INEPT ve DEPT puls dizilerinin, kuantum bilgisayarlarındaki sırasıyla, denetimli-değil (CN) ve değil (NOT) mantık geçitleri olarak algılanabilecekleri konusunda yapılan işlemlere yer verilmiştir. Bu çerçevede, iki kubitli IS ( $I=1/2$ ,  $S=1/2$ ) ÇMR sisteminin dört öz durumu ile yine, iki kubitli IS ( $I=1/2$ ,  $S=3/2$ ) ÇMR sisteminin sekiz öz durumu Dirac gösteriminde ifade edilmişlerdir ve bu öz durumların her biri, mantık geçitlerinin girişleri olarak kullanılmışlardır.

Kesim 2.4'teki bilgileri göz önüne alarak başlıca amacımızı, kuantum bilgisayarlarının, çekirdek magnetik rezonans (ÇMR) tekniklerini kullanarak nasıl işlerlik kazandığını tanımlamak olarak özetleyebiliriz.

##### 4.1. Denetimli-Değil (CN) Mantık Geçidi olarak İki Kubitli IS ( $I=1/2$ , $S=1/2$ ) Sistemi için INEPT ÇMR Deneyi

Zayıf çiftlenimli bir IS ( $I=1/2$ ,  $S=1/2$ ) spin sistemi olarak  $I=^1\text{H}$  ve  $S=^{13}\text{C}$  çekirdeklerinden oluşmuş bir molekül [örneğin, kloroform ( $\text{CHCl}_3$ )] düşünebiliriz. Bu sistemin öz durumları, Dirac gösteriminde

$$|\alpha\alpha\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |+\rangle = |00\rangle$$

$$|\alpha\beta\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |+\rangle = |01\rangle$$

$$|\beta\alpha\rangle = \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |-\rangle = |10\rangle$$

$$|\beta\beta\rangle = \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |-\rangle = |11\rangle \quad (4.1.1)$$

biçiminde yazılabilir.

Öte yandan  $^1\text{H}$  için jromagnetik oran  $\gamma_H = 26,75 \cdot 10^7 \text{ T}^{-1} \text{ s}^{-1}$  ve  $^{13}\text{C}$  için ise  $\gamma_{^{13}\text{C}} = 6,73 \cdot 10^7 \text{ T}^{-1} \text{ s}^{-1}$  olup  $\alpha = \frac{\gamma_C}{\gamma_H} = 0.25$  alınarak Şekil 3.2.1'de verilen INEPT puls dizisinin her aşaması için yazılan yoğunluk operatörlerini

$$\sigma_0 = I_z + 0.25S_z \quad (4.1.2)$$

$$\sigma_1 = -I_y + 0.25S_z \quad (4.1.3)$$

$$\sigma_2 = -\frac{\sqrt{2}}{2}I_y + \sqrt{2}I_xS_z + 0.25S_z \quad (4.1.4)$$

$$\sigma_3 = \frac{\sqrt{2}}{2}I_y - \sqrt{2}I_xS_z - 0.25S_z \quad (4.1.5)$$

$$\sigma_4 = -2I_xS_z - 0.25S_z \quad (4.1.6)$$

$$\sigma_5 = -2I_zS_y + 0.25S_y \quad (4.1.7)$$

$$\sigma_6 = 2S_yS_I S'_J \quad (4.1.8)$$

biçiminde elde ederiz.

Denklem (4.1.1) ile verilen her bir öz duruma ( ya da mantık geçidinin girişi) ardışık olarak uygulama işlemi yapılabilir. Buna göre, her bir öz duruma yoğunluk operatörlerinin uygulanmasının sonuçları aşağıdaki gibi olmaktadır.

a)  $|++\rangle = |00\rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar:

$$\sigma_0|++\rangle \Rightarrow 0.63|++\rangle$$

$$\sigma_1(0.63|++\rangle) \Rightarrow -0.32i|-\rangle + 0.08|++\rangle$$

$$\sigma_2(-0.32i|-\rangle + 0.08|++\rangle) \Rightarrow (0.122 - 0.112i)|++\rangle + (-0.068i + 0.028)|-\rangle$$

$$\sigma_3[(0.122 - 0.112i)|++\rangle + (-0.068i - 0.028)|-\rangle] \Rightarrow \\ (0.09i - 0.007)|-\rangle + (-0.048 + 0.028i)|++\rangle$$

$$\sigma_4[(0.09i - 0.007)|-\rangle + (-0.048 + 0.028i)|++\rangle] \Rightarrow \\ (-0.056 - 0.048i)|++\rangle + (0.0249 - 0.0253i)|-\rangle$$

$$\sigma_5[(-0.056 - 0.048i)|++\rangle + (0.0249 - 0.0253i)|-\rangle] \Rightarrow \\ (0.021i - 0.018)|+-\rangle + (0.009i + 0.016)|--\rangle$$

$$\sigma_6[(0.021i - 0.018)|+-\rangle + (0.009i + 0.016)|--\rangle] \Rightarrow \\ (0.018i + 0.021)|++\rangle + (-0.016i + 0.009)|-\rangle \cong 0.021|++\rangle \cong 0.021|00\rangle$$

Burada gerçel ve katsayısı büyük olan terim sonuç olarak alınmıştır.

b)  $|+-\rangle = |01\rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar:

$$\sigma_0|+-\rangle \Rightarrow 0.375|+-\rangle$$

$$\sigma_1(0.375|+-\rangle) \Rightarrow -0.1875i|--\rangle - 0.125|+-\rangle$$

$$\sigma_2(-0.1875i|--\rangle - 0.125|+-\rangle) \Rightarrow (0.08 + 0.065i)|+-\rangle + (0.04 + 0.06i)|--\rangle$$

$$\sigma_3[(0.08 + 0.065i)|+-\rangle + (0.04 + 0.06i)|--\rangle] \Rightarrow \\ (0.055i + 0.013)|--\rangle + (0.014i + 0.045)|+-\rangle$$

$$\sigma_4[(0.055i + 0.013)|--\rangle + (0.014i + 0.045)|+-\rangle] \Rightarrow \\ (0.029i + 0.012)|+-\rangle + (0.0138i + 0.0241)|--\rangle$$

$$\sigma_5[(0.029i + 0.012)|+-\rangle + (0.0138i + 0.0241)|--\rangle] \Rightarrow \\ (0.0045i - 0.01)|++\rangle + (-0.015i + 0.0086)|-+\rangle$$

$$\sigma_6[(-0.01 + 0.045i)|++\rangle + (0.0086 - 0.015i)|-+\rangle] \Rightarrow \\ (-0.01i - 0.0045)|+-\rangle + (0.0086i + 0.015)|--\rangle \cong 0.015|--\rangle \cong 0.015|11\rangle$$

Burada yine gerçel ve katsayısı büyük olan sonuç göz önüne alınmıştır.

c)  $| - + \rangle = | 10 \rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar:

$$\sigma_0| - + \rangle \Rightarrow -0.375| - + \rangle$$

$$\sigma_1(-0.375)| - + \rangle \Rightarrow (-0.1875i)| ++ \rangle - (0.0468)| - + \rangle$$

$$\sigma_2[(-0.1875i)| ++ \rangle - (0.0468)| - + \rangle] \Rightarrow (-0.07 - 0.065i)| - + \rangle + (-0.016 - 0.008i)| ++ \rangle$$

$$\sigma_3[(-0.07 - 0.065i)| - + \rangle + (-0.016 - 0.008i)| ++ \rangle] \Rightarrow \\ (0.0482i + 0.00375)| ++ \rangle + (0.0058i + 0.017)| - + \rangle$$

$$\sigma_4[(0.0482i + 0.00375)| ++ \rangle + (0.0058i + 0.017)| - + \rangle] \Rightarrow \\ (-0.02i - 0.0038)| - + \rangle + (-0.0089i - 0.0089)| ++ \rangle$$

$$\sigma_5[(-0.02i - 0.0038)| - + \rangle + (-0.0089i - 0.0089)| ++ \rangle] \Rightarrow \\ (-0.004i + 0.0125)| -- \rangle + (0.0034i - 0.0034)| +- \rangle$$

$$\sigma_6[(-0.004i + 0.0125)| -- \rangle + (-0.0034i - 0.0034)| +- \rangle] \Rightarrow \\ (-0.0125i - 0.004)| - + \rangle + (0.0034i + 0.0034)| ++ \rangle \cong 0.004| - + \rangle \cong 0.004| 10 \rangle$$

sonucu elde edilmiştir.

d)  $| - - \rangle = | 11 \rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar:

$$\sigma_0|--\rangle \Rightarrow -0.625|--\rangle$$

$$\sigma_1(-0.625|--\rangle) \Rightarrow (-0.3125i|+-\rangle) + (0.078|--\rangle)$$

$$\sigma_2[(-0.3125i|+-\rangle) + (0.078|--\rangle)] \Rightarrow (-0.1197 + 0.109i|--\rangle) + (-0.027 + 0.066i|+-\rangle)$$

$$\sigma_3[(-0.1197 + 0.109i|--\rangle) + (-0.027 + 0.066i|+-\rangle)] \Rightarrow$$

$$(0.0878i - 0.0068|+-\rangle) + (-0.0469 + 0.0276i|--\rangle)$$

$$\sigma_4[(0.0878i - 0.0068|+-\rangle) + (-0.0469 + 0.0276i|--\rangle)] \Rightarrow$$

$$(0.0469i - 0.0024|--\rangle) + (-0.024 + 0.024i|+-\rangle)$$

$$\sigma_5[(0.0469i - 0.0024|--\rangle) + (-0.024 + 0.024i|+-\rangle)] \Rightarrow$$

$$(0.0288 + 0.0015i|-+\rangle) + (-0.009 - 0.009i|++\rangle)$$

ve son olarak

$$\sigma_6[(0.0288 + 0.0015i|-+\rangle) + (-0.009 - 0.009i|++\rangle)] \Rightarrow$$

$$(0.0288i - 0.0015|--\rangle) + (-0.009i + 0.009|+-\rangle) \cong 0.009|+-\rangle \cong 0.009|01\rangle$$

sonucu elde edilmiştir. Elde edilen bu sonuçların, kuantum bilgisayarlarındaki denetimli-değil (CN) mantık geçidinin doğruluk çizelgesi (bkz. Çizelge 2.4.2.3) ile karşılaştırılması ise Çizelge 4.1.1'de verilmiştir.

Çizelge 4.1.1. Zayıf çiftlenimi IS (I=1/2, S=1/2) spin sistemi için INEPT ÇMR deneyinin CN mantık geçidi gibi davranışı

GİRİŞ		ÇIKIŞ	
INEPT	CN	$U_{INEPT}$ (Gerçel ve yaklaşık sonuçlar)	CN
$ ++\rangle$	$ 00\rangle$	$0.21 ++\rangle$	$ 00\rangle$
$ +-\rangle$	$ 01\rangle$	$0.015 --\rangle$	$ 11\rangle$
$ -+\rangle$	$ 10\rangle$	$0.004 -+\rangle$	$ 10\rangle$
$  --\rangle$	$ 11\rangle$	$0.009 +-\rangle$	$ 01\rangle$

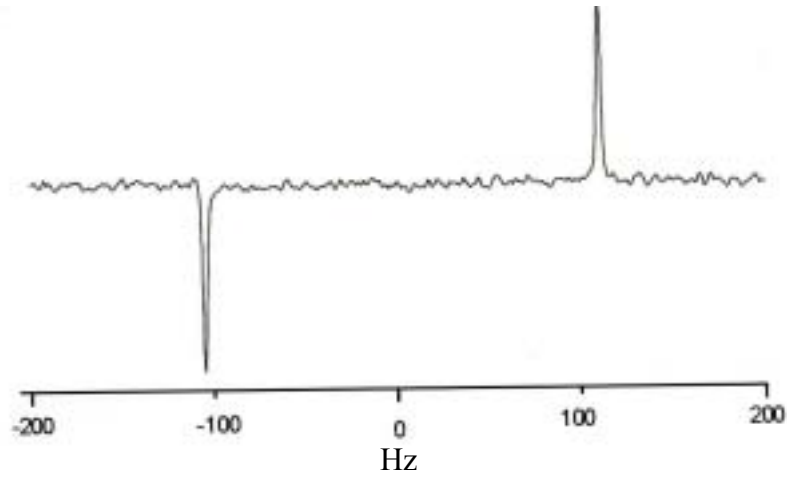
(Burada  $U_{INEPT}$ , INEPT puls dizisi çıkışında elde edilen sonuçları ifade etmektedir)

Çizelge 4.1.1’de verilen bu karşılaştırma, bütünüyle kuantum mekaniksel olarak tanımlanan ÇMR sistemi için INEPT puls dizisinin kuantum bilgisayarlarında denetimli-değil (CN) mantık geçidi gibi davrandığını ortaya koymaktadır. Bu davranışı ayrıntılı olarak şöyle açıklayabiliriz. Çizelge 4.1.1 den görüldüğü gibi INEPT puls dizisinin girişine uygulanan iki kübitten ikincisine ait değerler,  $U_{INEPT}$  işleminden sonra, eğer ikinci kübit (CN geçidinde denetim biti) girişte  $|+\rangle = |0\rangle$  ise birinci kübit (CN geçidinde hedef biti) girişteki değerini koruyor. Ancak, denetim biti girişte  $|-\rangle = |1\rangle$  ise hedef biti çıkışta, girişteki değerini değili işlemine uğramış olmaktadır. Yani, yaptığımız hesaplamalar INEPT puls dizisinin, I spinini denetleyen S spini olarak bir CN mantık geçidi gibi davranışını sergilemektedir. Elde edilen sonuç, Kesim 2.4.2 de Denklem (2.4.2.5) ile verilen tanıma dayanarak INEPT puls dizisinin bir CN mantık geçidi gibi davranışını açıklayan Vandersypen ve ortakları ile Lindan ve ortaklarının çalışması ile büyük bir uyum göstermektedir (Vandersypen vd., 2002; Lindan vd., 1999).

Sonuç olarak bu çalışmanın, ÇMR bilgisayarları için çok-pulslu deneylerin mantık geçitleri gibi işlev gördükleri araştırmasında, genellikle Denklem (2.4.2.5) ile verilen tanımlamaya karşılık alternatif bir yöntem oluşturduğunu söyleyebiliriz.

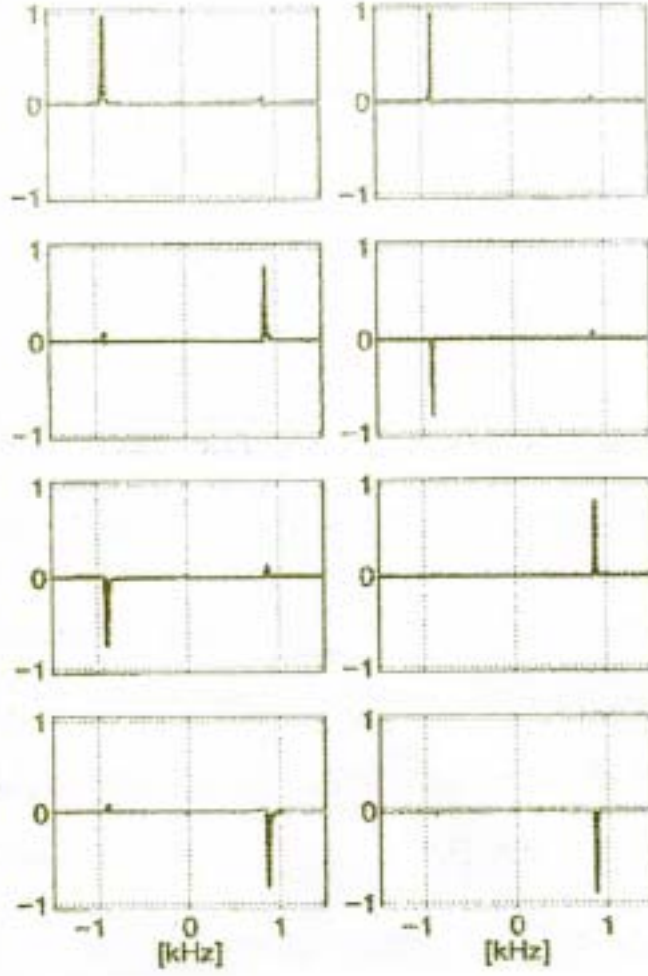
Ancak bu konuyu kapatmadan önce şu önemli noktayı belirtmekte yarar görmekteyiz. Bu ise, INEPT puls dizisindeki saf ya da sanki öz durumları, yani,  $|++\rangle$ ,  $|+-\rangle$ ,  $|-\rangle$  ve  $|--\rangle$  kübitlerini girişte nasıl ve hangi koşullarda ayırt edebileceğimizdir. Yani, başlangıçta karışmış olan bu durumlar yerine girişler olarak saf durumları nasıl yaratabiliriz? Bununla ilgili olarak belirleyici kuantum algoritmalar ( Gershenfeld ve Chuang, 1997), etkin saf durumlar ( Chuang ve ort., 1998), seçici radyofrekans uygulama teknikleri (Sarhour vd., 2003) ve sıvı kristal çözücüler kullanma tekniği (Yannoni vd., 1999) gibi yöntemler kullanılmaktadır.

Örnek olarak kullandığımız  $\text{CHCl}_3$  kloroform için (Aseton  $-D_6$  da %5 lik çözelti olarak) INEPT ÇMR deneyinden elde edilen  $^{13}\text{C}$  spektrumu Şekil 4.1.1 de gösterilmektedir (Braun vd., 1999).



Şekil 4.1.1. CHCl<sub>3</sub> kloroform için <sup>13</sup>C INEPT spektrumu

Öte yandan, ZLI-1667 sıvı kristal çözeltilerdeki <sup>13</sup>C <sup>1</sup>HCl<sub>3</sub> kloroform örneği için <sup>13</sup>C-<sup>1</sup>H spin çiftlenimi, aseton-d<sub>6</sub> çözeltilisindeki kloroformun spin-spin sabitinden sekiz kez daha büyük olduğundan, kuantum hesaplamada (bilgisayar) da sekiz kat daha hızlı olur ve girişler olarak karbon ve proton spinleri, Grover araştırma algoritması kullanarak etkin saf durumları hazırlayabilirler (Yannoni vd., 1999). Bu çerçevede Şekil 4.1.2'de sıvı kristal çözeltilerdeki <sup>13</sup>C<sup>1</sup>HCl<sub>3</sub> maddesi kullanılarak iki-kübit durumları resmedilmiştir.



Şekil 4.1.2. Sıvı kristal çözeltideki  $^{13}\text{C}^1\text{HCl}_3$ 'ün soğurma ve yayılma çizgileri (yalnız biri görülmektedir),  $x_0 = |00\rangle$ ,  $|01\rangle$ ,  $|10\rangle$  ve  $|11\rangle$  etkin saf durumlar, solda  $^1\text{H}$  ve sağda  $^{13}\text{C}$  için olmak üzere tepeden aşağıya doğru açık olarak gösterilmiştir. Burada  $\nu_H$  ve  $\nu_C$  ye göre ÇMR çizgileri kHz cinsinden verilmektedir (Yannoni vd., 1999)

#### 4.2. Zayıf Çiftlenimli (I=1/2, S=1/2) Spin Sistemi için DEPT ÇMR Deneyinin Değil Mantık Geçidi olarak kullanımı

Denklem (4.1.1) ile verilen öz durumlara, Kesim 3.3'de verilen DEPT puls dizisindeki yoğunluk operatörlerinin uygulaması bu kesimde yapılmıştır. Örnek olarak yine  $^{13}\text{C}^1\text{HCl}_3$  kloroform maddesi seçilmiştir. Burada,  $^1\text{H}$  için jromagnetik oran  $\gamma_H = 26,75 \cdot 10^7 \text{ T}^{-1} \text{ s}^{-1}$  ve  $^{13}\text{C}$  için ise  $\gamma_{^{13}\text{C}} = 6,73 \cdot 10^7 \text{ T}^{-1} \text{ s}^{-1}$  dir ve  $\alpha = \frac{\gamma_C}{\gamma_H} = 0.25$  alınarak uygulanacak olan yoğunluk operatörleri düzenlenmiştir.

Buna göre elde edilen hesaplama sonuçları aşağıdaki gibi olmaktadır.

a)  $|++\rangle = |00\rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar:

$$\begin{aligned} \sigma_0 |++\rangle &\Rightarrow 0.625 |++\rangle \\ \sigma_1 (0.625 |++\rangle) &\Rightarrow [(0.0781 |++\rangle) - (0.3125i |+-\rangle)] \\ \sigma_2 [(0.0781 |++\rangle) - (0.3125i |+-\rangle)] &\Rightarrow [(0.0391 |+-\rangle) - (0.1563i |++\rangle)] \\ \sigma_3 [(0.0391 |+-\rangle) - (0.1563i |++\rangle)] &\Rightarrow [(-0.0196i |+-\rangle) - (0.0782 |--\rangle)] \\ \sigma_4 [(-0.0196i |+-\rangle) - (0.0782 |--\rangle)] &\Rightarrow [(-0.0098)(\sin \theta) |++\rangle - (0.0391i)(\sin \theta) |+-\rangle] \\ \sigma_5 [(-0.0098)(\sin \theta) |++\rangle - (0.0391i)(\sin \theta) |+-\rangle] &\Rightarrow \\ [(-0.005)(\sin^2 \theta) |+-\rangle + (0.0196i)(\sin^2 \theta) |--\rangle] & \\ \cong (-0.005) \sin^2 \theta |+-\rangle \cong (-0.005) \sin^2 \theta |01\rangle & \end{aligned}$$

Burada gerçel sonuç dikkate alınmıştır.

b)  $|+-\rangle = |01\rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar:

$$\begin{aligned} \sigma_0 |+-\rangle &\Rightarrow (0.375) |+-\rangle \\ \sigma_1 (0.375) |+-\rangle &\Rightarrow [(-0.0469) |+-\rangle - (0.1875i) |--\rangle] \\ \sigma_2 [(-0.0469) |+-\rangle - (0.1875i) |--\rangle] &\Rightarrow [(0.0235) |--\rangle + (0.0938i) |+-\rangle] \\ \sigma_3 [(0.0235) |--\rangle + (0.0938i) |+-\rangle] &\Rightarrow [(0.0118i) |++\rangle - (0.0469) |+-\rangle] \\ \sigma_4 [(0.0118i) |++\rangle - (0.0469) |+-\rangle] &\Rightarrow [(-0.0059)(\sin \theta) |+-\rangle + (0.0235i)(\sin \theta) |--\rangle] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sigma_6 [(-0.0059)(\sin \theta)|+- \rangle + (0.0235i)(\sin \theta)|-- \rangle] \Rightarrow \\ & [(-0.003)(\sin^2 \theta)|++ \rangle - (0.0118i)(\sin^2 \theta)|+- \rangle] \\ & \cong (-0.003)(\sin^2 \theta)|++ \rangle \cong (-0.003)(\sin^2 \theta)|00 \rangle \end{aligned}$$

Burada da gerçel sonuç dikkate alınmıştır.

c)  $|+- \rangle = |10 \rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar:

$$\begin{aligned} & \sigma_0 |+- \rangle \Rightarrow (-0.375)|+- \rangle \\ & \sigma_1 (-0.375)|+- \rangle \Rightarrow [(-0.0469)|+- \rangle - (0.1875i)|++ \rangle] \\ & \sigma_2 [(-0.0469)|+- \rangle - (0.1875i)|++ \rangle] \Rightarrow [(-0.0234)|++ \rangle - (0.0938i)|+- \rangle] \\ & \sigma_3 [(-0.0234)|++ \rangle - (0.0938i)|+- \rangle] \Rightarrow [(0.0117i)|-- \rangle - (0.0469)|+- \rangle] \\ & \sigma_5 [(0.0117i)|-- \rangle - (0.0469)|+- \rangle] \Rightarrow [(-0.0059)(\sin \theta)|+- \rangle + (0.0235i)(\sin \theta)|++ \rangle] \\ & \sigma_6 [(-0.0059)(\sin \theta)|+- \rangle + (0.0235i)(\sin \theta)|++ \rangle] \Rightarrow \\ & [(0.003)(\sin^2 \theta)|-- \rangle + (0.0118i)(\sin^2 \theta)|+- \rangle] \\ & \cong (0.003)(\sin^2 \theta)|-- \rangle \cong (0.003)(\sin^2 \theta)|11 \rangle \end{aligned}$$

sonucu elde edilmiştir.

d)  $|-- \rangle = |11 \rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar:

$$\begin{aligned} & \sigma_0 |-- \rangle \Rightarrow (-0.625)|-- \rangle \\ & \sigma_1 (-0.625)|-- \rangle \Rightarrow [(0.0781)|-- \rangle - (0.3125i)|+- \rangle] \\ & \sigma_2 [(0.0781)|-- \rangle - (0.3125i)|+- \rangle] \Rightarrow [(-0.0391)|+- \rangle + (0.1563i)|-- \rangle] \\ & \sigma_3 [(-0.0391)|+- \rangle + (0.1563i)|-- \rangle] \Rightarrow [(-0.0196i)|+- \rangle - (0.0782)|++ \rangle] \\ & \sigma_5 [(-0.0196i)|+- \rangle - (0.0782)|++ \rangle] \Rightarrow [(-0.0098)(\sin \theta)|-- \rangle - (0.0391i)(\sin \theta)|+- \rangle] \\ & \sigma_6 [(-0.0098)(\sin \theta)|-- \rangle - (0.0391i)(\sin \theta)|+- \rangle] \Rightarrow \\ & [(0.005)(\sin^2 \theta)|+- \rangle - (0.0196i)(\sin^2 \theta)|++ \rangle] \\ & \cong (0.005)(\sin^2 \theta)|+- \rangle \cong (0.005)(\sin^2 \theta)|10 \rangle \end{aligned}$$

sonucu bulunmuştur.

Elde edilen bu sonuçların, klasik ve kuantum bilgisayarlarındaki değil (NOT) mantık geçidinin doğruluk çizelgesi (bkz. Çizelge 2.3.2.1) ile karşılaştırılması Çizelge 4.2.1’de verilmiştir.

Çizelge 4.2.1. Zayıf çiftlenimi IS ( $I=1/2$ ,  $S=1/2$ ) spin sistemi için DEPT ÇMR deneyinin Değil mantık geçidi gibi davranışı

GİRİŞ		ÇIKIŞ	
DEPT	Değil	$U_{DEPT}$ (Gerçel ve yaklaşık sonuçlar)	Değil
$ ++\rangle$	$ 00\rangle$	$(-0.005)\sin^2\theta +-\rangle$	$ 01\rangle$
$ +-\rangle$	$ 01\rangle$	$(-0.003)(\sin^2\theta) ++\rangle$	$ 00\rangle$
$ --\rangle$	$ 10\rangle$	$(0.003)(\sin^2\theta) --\rangle$	$ 11\rangle$
$ +-\rangle$	$ 11\rangle$	$(0.005)(\sin^2\theta) +-\rangle$	$ 10\rangle$

(Burada  $U_{DEPT}$ , DEPT puls dizisi çıkışında elde edilen sonuçları ifade etmektedir)

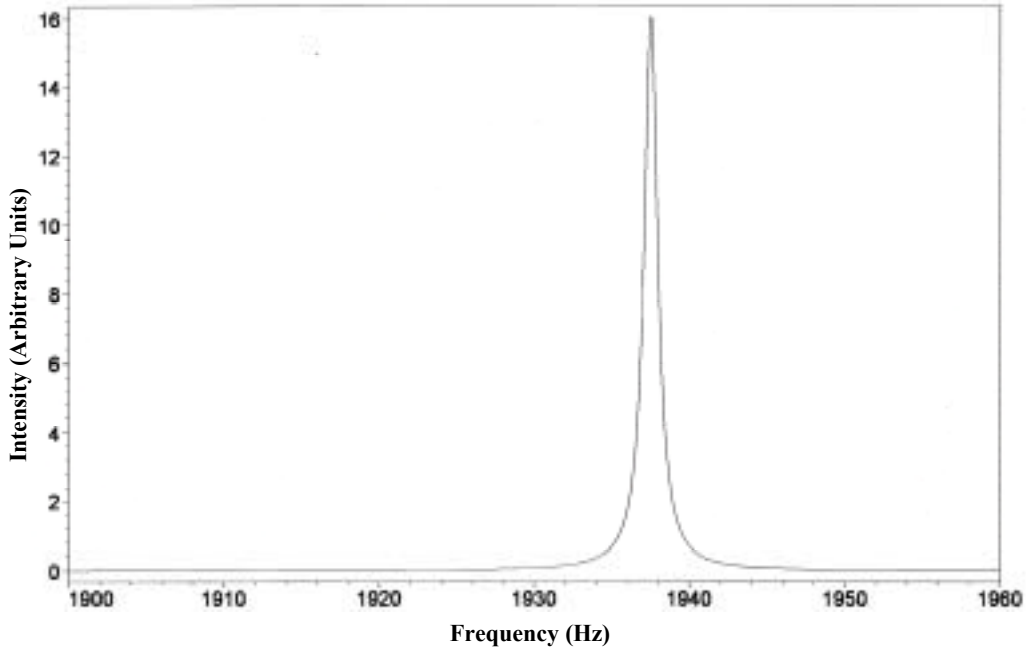
Çizelge 4.2.1, DEPT ÇMR puls dizisinin, S spin durumları için çıkışta, başlangıç durumlarının değili işlemi yaptığını ortaya koymaktadır. Örneğin, başlangıçta IS ( $I=1/2$ ,  $S=1/2$ ) spin sistemi için  $|--\rangle = |11\rangle$  durumu varsa bu çıkışta  $|+-\rangle = |10\rangle$  olmaktadır. Yani, I spin durumu değişmemekte sadece S spin durumunun değili çıkışta elde edilmektedir.  $^{13}\text{C}^1\text{HCl}_3$  (kloroform)’un DEPT ÇMR deneyi, Şekil 3.3.1’de verilen puls dizisindeki son  $^1\text{H}$  pulsunun uzunluğu, yani  $\theta$  açısı  $45^\circ$  den  $135$  dereceye kadar değiştirilerek, metin (CH) grubu için sinyal, pulsa bağlı olarak belirlenmiştir. Buna göre elde edilen deneysel sonuç Çizelge 4.2.2’de özetlenmiştir.

Çizelge 4.2.2.  $^{13}\text{C}^1\text{HCl}_3$  için DEPT ÇMR deneyinin metin grubu için elde edilen sinyal şiddetleri (Rogers, 2004)

Spektrum	Açı	Sinyal CH (Metin)
1	$45^\circ$	0.707
2	$90^\circ$	1
3	$135^\circ$	0.707

Öte yandan,  $\theta=90^\circ$  için kimyasal kayma  $77.5$  ppm ve  $T_2$  enine durulma zamanı  $0.3$  s alınarak Maple bilgisayar programında, DEPT ÇMR deneyinin simülasyonu

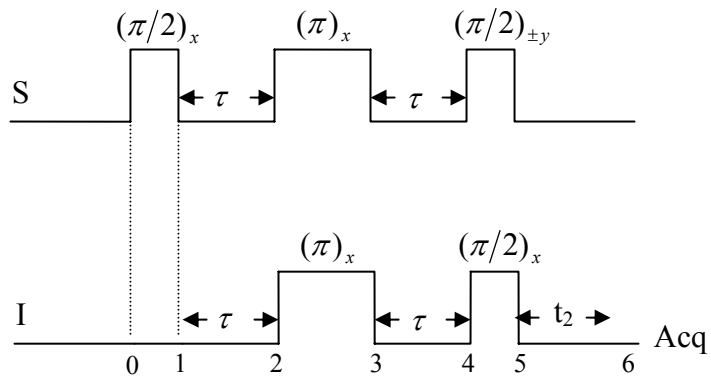
yapılmıştır. Bu bilgisayar benzetiminden elde edilen spektrum çizgisi Şekil 4.2.1 de verilmektedir.



Şekil 4.2.1. Maple programı kullanılarak kloroformdaki (CH) metin grubu için elde edilen spektrum

### 4.3. Zayıf Çiftlenimli ( $I=1/2$ , $S=3/2$ ) Spin Sistemi için INEPT ÇMR Deneyinin Denetimli –Değil (CN) Mantık Geçidi Gibi Kullanımı

Burada, zayıf çiftlenimli IS ( $I=1/2$ ,  $S=3/2$ ) spin sistemi için INEPT ÇMR deneyinin çarpım operatör kuramı kullanılarak tanımlanmasından yararlanılmıştır (Tokatlı vd., 2004). Bu çerçevede, INEPT puls dizisindeki algılama Şekil 4.3.1 de görüldüğü üzere I spinini üzerinden yapılmaktadır.



Şekil 4.3.1. INEPT puls dizisi ( $\tau = 1/4J$ )

Buna göre, yüksek jromagnetik oranlı ve yüksek doğal bolluklu (%80.1) çekirdek olarak spini 3/2 olan  $^{11}\text{B}$  ve düşük jromagnetik oran ve düşük doğal bolluklu çekirdek olarak ta yine, spini 1/2 olan  $^{13}\text{C}$  alınabilir ( Örneğin, alkenlerin hidrokarbon bileşikleri ) (Tezel vd., 2003).

İşlemlere geçmeden önce, I ( $=^{13}\text{C}$ ) S ( $=^{11}\text{B}$ ) ( I=1/2, S=3/2 ) için sekiz spin öz durumunu Dirac gösteriminde aşağıdaki gibi belirleriz.

$$\begin{array}{ll}
 \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle = |0\rangle & \left| -\frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle = |4\rangle \\
 \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle = |1\rangle & \left| -\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle = |5\rangle \\
 \left| \frac{1}{2} \quad -\frac{1}{2} \right\rangle = |2\rangle & \left| -\frac{1}{2} \quad -\frac{1}{2} \right\rangle = |6\rangle \\
 \left| \frac{1}{2} \quad -\frac{3}{2} \right\rangle = |3\rangle & \left| -\frac{1}{2} \quad -\frac{3}{2} \right\rangle = |7\rangle
 \end{array} \quad (4.3.1)$$

Buna göre,  $\gamma_{^{11}\text{B}} = 8,58.10^7 T^{-1}s^{-1}$  ve  $\gamma_{^{13}\text{C}} = 6,73.10^7 T^{-1}s^{-1}$  olduğundan

$\alpha = \frac{\gamma_C}{\gamma_B} = 0.78$  alınarak ve Şekil 4.3.1 deki numaralarla gösterilen her aşamadaki

yoğunluk matris operatörlerini

$$\sigma_0 = S_z + 0.78I_z \quad (4.3.2)$$

$$\sigma_1 = -S_y + 0.78I_z \quad (4.3.3)$$

$$\sigma_2 = -0.7S_y + 1.4I_z S_x + 0.78I_z \quad (4.3.4)$$

$$\sigma_3 = 0.7S_y - 1.4I_z S_x - 0.78I_z \quad (4.3.5)$$

$$\sigma_4 = -2I_z S_x - 0.78I_z \quad (4.3.6)$$

$$\sigma_5 = -2I_y S_z + 0.78I_y \quad (4.3.7)$$

$$\sigma_6 = -3I_y S_{3J} S_I + I_y S_J S_I \quad (4.3.8)$$

olarak elde ederiz. Bu operatörlerin ardışık olarak Denklem (4.3.1) de verilen her öz duruma uygulanması ise aşağıda verilmiştir.

$$a) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle = |0\rangle \text{ durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar}$$

$$\sigma_0 \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle \Rightarrow 1.89 \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_1(1.89) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle \Rightarrow (-1.63i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (0.73) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_2[(-1.63i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (0.73) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(1.26 - 0.98i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (0.44 - 1.08i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.44 - 1.14i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_3[(1.26 - 0.98i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (0.44 - 1.08i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.44 - 1.14i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(3.37i - 0.34) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (0.77i - 1.4) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (1.5i + 0.9) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (1.38) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_4[(3.37i - 0.34) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (0.77i - 1.4) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (1.5i + 0.9) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (1.38) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(-3.21i + 0.83) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (3.96i - 1.2) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-3.47i + 0.43) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.32 - 1.3i) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_5[(-3.21i + 0.83) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (3.96i - 1.2) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-3.47i + 0.43) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.32 - 1.3i) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(6.07 - 0.93i) \left| -\frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (-3.05i - 1.54) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.39 + 0.12i) \left| -\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.06i + 0.5) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_6[(6.07 - 0.93i) \left| -\frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (-3.05i - 1.54) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.39 + 0.12i) \left| -\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.06i + 0.5) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle]$$

$$\Rightarrow [(9.11i + 1.4)S_{3J}S_I + (-3.04i - 0.47)S_J S_I] \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$+ [(4.58 - 2.31i)S_{3J}S_I + (-1.53 + 0.77i)S_J S_I] \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$+ [(-0.59i - 0.18)S_{3J}S_I + (0.2i + 0.06)S_J S_I] \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$+[(1.59 + 0.75i)S_{3J}S_I + (-0.53 - 0.25i)S_J S_I] \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

Gerçel terimler göz önüne alındığında sonuç;

$$(1.4S_{3J}S_I - 0.47S_J S_I)|0\rangle + (4.58S_{3J}S_I - 1.53S_J S_I)|2\rangle$$

$$+ (0.06S_J S_I - 0.18S_{3J}S_I)|1\rangle + (1.59S_{3J}S_I - 0.53S_J S_I)|3\rangle$$

olarak elde edilmektedir.

b)  $\left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle = |1\rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar

$$\sigma_0 \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle \Rightarrow 0.89 \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_1(0.89) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle \Rightarrow (0.77i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle - (0.89i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.35) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_2[(0.77i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle - (0.89i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.35) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(1.23 - 0.16i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.54 - 0.54i) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.52 + 0.21) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.6i + 0.25) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_3[(1.23 - 0.16i) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.54 - 0.54i) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.52 + 0.21) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.6i + 0.25) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(-0.93i - 0.83) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (1.86i - 0.84) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.61i - 1.57) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (0.51i + 0.58) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_4[(-0.93i - 0.83) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (1.86i - 0.84) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.61i - 1.57) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (0.51i + 0.58) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(-1.3i + 2.17) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.8i + 0.5) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.17i + 1.68) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (-1.78i + 1.4) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_5[(-1.3i + 2.17) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.8i + 0.5) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.17i + 1.68) \left| \frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (-1.78i + 1.4) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(1.15 - 0.24i) \left| -\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right\rangle + (3.4 + 0.95i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.2 - 1.87i) \left| -\frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \right\rangle + (2.28 + 1.25i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
& \sigma_6[(1.15-0.24i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (3.4+0.95i)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (-0.2-1.87i)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (2.28+1.25i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle] \Rightarrow \\
& [(-0.3i+2.8)S_{3J}S_I + (0.1i-0.94)S_J S_I]\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle \\
& + [(1.73i+0.36)S_{3J}S_I + (-0.58i-0.12)S_J S_I]\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \\
& + [(3.42i-1.88)S_{3J}S_I + (-1.14i+0.63)S_J S_I]\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \\
& + [(5.1i-1.43)S_{3J}S_I + (-1.7i+0.48)S_J S_I]\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle
\end{aligned}$$

Gerçek terimler göz önüne alındığında;

$$\begin{aligned}
& (2.8S_{3J}S_I - 0.94S_J S_I)|0\rangle + (0.36S_{3J}S_I - 0.12S_J S_I)|1\rangle \\
& + (0.63S_J S_I - 1.88S_{3J}S_I)|2\rangle + (0.48S_J S_I - 1.43S_{3J}S_I)|3\rangle
\end{aligned}$$

elde edilir.

c)  $\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle = |2\rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar

$$\begin{aligned}
& \sigma_0\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle \Rightarrow -0.11\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle \\
& \sigma_1(-0.11)\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle \Rightarrow (-0.11i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (0.1i)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle - (0.04)\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle \\
& \sigma_2[(-0.11i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (0.1i)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle - (0.04)\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle] \Rightarrow \\
& (-0.07-0.06i)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (-0.16-0.02i)\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle + (-0.03-0.08i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.03+0.07i)\left|\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\right\rangle \\
& \sigma_3[(-0.07-0.06i)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (-0.16-0.02i)\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle + (-0.03-0.08i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.03+0.07i)\left|\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\right\rangle] \Rightarrow \\
& (0.23i+0.14)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.09i+0.09)\left|\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\right\rangle + (0.09i-0.05)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (0.02i+0.2)\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle \\
& \sigma_4[(0.23i+0.14)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.09i+0.09)\left|\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\right\rangle + (0.09i-0.05)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (0.02i+0.2)\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle] \Rightarrow \\
& (-0.24i-0.1)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (-0.15i+0.3)\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle + (-0.19i-0.21)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (0.02i-0.21)\left|\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\right\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sigma_5 [(-0.24i - 0.1) \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.15i + 0.3) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.19i - 0.21) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (0.02i - 0.21) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow \\
& (0.1i - 0.27) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (0.14 + 0.27i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.03 + 0.02i) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.03 - 0.4i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \\
& \sigma_6 [(0.1i - 0.27) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (0.14 + 0.27i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.03 + 0.02i) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.03 - 0.4i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow \\
& [(-0.17 - 0.41i) S_{3J} S_I + (0.06 + 0.14i) S_J S_I] \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle \\
& + [(-0.05i - 0.03) S_{3J} S_I + (0.02i + 0.01) S_J S_I] \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \\
& + [(0.21i - 0.41) S_{3J} S_I + (-0.07i + 0.14) S_J S_I] \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \\
& + [(-0.05i + 0.6) S_{3J} S_I + (0.02i - 0.2) S_J S_I] \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle
\end{aligned}$$

Gerçek terimler göz önüne alınırsa;

$$\begin{aligned}
& (0.06 S_J S_I - 0.17 S_{3J} S_I) |0\rangle + (0.01 S_J S_I - 0.03 S_{3J} S_I) |1\rangle \\
& + (0.14 S_J S_I - 0.41 S_{3J} S_I) |2\rangle + (0.6 S_{3J} S_I - 0.2 S_J S_I) |3\rangle
\end{aligned}$$

elde edilir.

d)  $\left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle = |3\rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar

$$\begin{aligned}
& \sigma_0 \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \Rightarrow -1.11 \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \\
& \sigma_1 (-1.11) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \Rightarrow (-0.96i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle - (0.43) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \\
& \sigma_2 [(-0.96i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle - (0.43) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow \\
& (0.67 - 0.67i) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.75 - 0.58i) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.26 - 0.63i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \\
& \sigma_3 [(0.67 - 0.67i) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.75 - 0.58i) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.26 - 0.63i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle] \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (-0.8) \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (2.1i + 0.25) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.44i + 0.08) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (0.45i + 0.83) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \\
& \sigma_4 [(-0.8) \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (2.1i + 0.25) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.44i + 0.08) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (0.45i + 0.83) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow \\
& (0.47 - 2.27i) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-2i - 0.54) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.38i + 0.38) \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (-1.65i - 0.96) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \\
& \sigma_5 [(0.47 - 2.27i) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-2i - 0.54) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.38i + 0.38) \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (-1.65i - 0.96) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle] \Rightarrow \\
& (0.15i - 0.26) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.27i + 0.72) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (-1.81i + 3.12) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.02i + 3.78) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \\
& \sigma_6 [(0.15i - 0.26) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.27i + 0.72) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (-1.81i + 3.12) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-1.02i + 3.78) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow \\
& [(-0.23 - 0.39i)S_{3J}S_I + (0.08 + 0.13i)S_J S_I] \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \\
& + [(0.41 + 1.08i)S_{3J}S_I + (-0.14 - 0.36i)S_J S_I] \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle \\
& + [(-2.72 - 4.68i)S_{3J}S_I + (-0.91 - 1.56i)S_J S_I] \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \\
& + [(1.53 - 5.67i)S_{3J}S_I + (0.51 - 1.89i)S_J S_I] \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle
\end{aligned}$$

Gerçel terimler göz önüne alındığında;

$$\begin{aligned}
& (0.08S_J S_I - 0.23S_{3J}S_I)|1\rangle + (0.41S_{3J}S_I - 0.14S_J S_I)|0\rangle \\
& + (-0.91S_J S_I - 2.72S_{3J}S_I)|2\rangle + (1.53S_{3J}S_I + 0.51S_J S_I)|3\rangle
\end{aligned}$$

elde edilir.

$$\text{e) } \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle = |4\rangle \text{ durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar}$$

$$\begin{aligned}
& \sigma_0 \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle \Rightarrow 1.11 \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle \\
& \sigma_1 (1.11) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle \Rightarrow (-0.96i) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle - (0.44) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sigma_2[(-0.96i)\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle - (0.44)\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle] \Rightarrow \\
& (0.75 + 0.58i)\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (0.27 - 0.1i)\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.67 + 0.67i)\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle \\
& \sigma_3[(0.75 + 0.58i)\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (0.27 - 0.1i)\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.67 + 0.67i)\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle] \Rightarrow \\
& (0.4 + 0.01i)\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (1.24i + 0.44)\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (0.38i)\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.82)\left|-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle \\
& \sigma_4[(0.4 + 0.01i)\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (1.24i + 0.44)\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (0.38i)\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.82)\left|-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle] \Rightarrow \\
& (0.54 + 1.07i)\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (0.52 + 0.47i)\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.27 + 1.39i)\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + (0.33i + 0.32)\left|-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle \\
& \sigma_5[(0.54 + 1.07i)\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (0.52 + 0.47i)\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.27 + 1.39i)\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + (0.33i + 0.32)\left|-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle] \Rightarrow \\
& (-1.19 + 0.6i)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (-0.06 + 0.06i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (1.24 + 0.25i)\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + (0.63 - 0.6i)\left|\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle \\
& \sigma_6[(-1.19 + 0.6i)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (-0.06 + 0.06i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (1.24 + 0.25i)\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + (0.63 - 0.6i)\left|\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle] \Rightarrow \\
& [(1.79i + 0.9)S_{3J}S_I + (-0.6i - 0.3)S_J S_I]\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle \\
& + [(0.09i + 0.09)S_{3J}S_I + (-0.03i - 0.03)S_J S_I]\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \\
& + [(-1.86i + 0.38)S_{3J}S_I + (0.62i - 0.13)S_J S_I]\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle \\
& + [(-0.95i - 0.9)S_{3J}S_I + (0.32 + 0.3)S_J S_I]\left|-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle
\end{aligned}$$

Burada yine gerçel terimler alınırsa;

$$\begin{aligned}
& (0.9S_{3J}S_I - 0.3S_J S_I)|4\rangle + (0.09S_{3J}S_I - 0.03S_J S_I)|5\rangle \\
& + (0.38S_{3J}S_I - 0.13S_J S_I)|6\rangle + (-0.9S_{3J}S_I + 0.3S_J S_I)|7\rangle
\end{aligned}$$

elde edilir.

f)  $\left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle = |5\rangle$  durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar

$$\sigma_0 \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle \Rightarrow 0.11 \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\sigma_1(0.11) \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle \Rightarrow (0.03i) \left|-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (-0.11i) \left|-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.04) \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\sigma_2[(0.03i) \left|-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (-0.11i) \left|-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle + (-0.04) \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle] \Rightarrow$$

$$(0.12 + 0.06i) \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle + (-0.07 + 0.07i) \left|-\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\right\rangle + (0.03 - 0.04i) \left|-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (0.02 + 0.07i) \left|-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\sigma_3[(0.12 + 0.06i) \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle + (-0.07 + 0.07i) \left|-\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\right\rangle + (0.03 - 0.04i) \left|-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (0.02 + 0.07i) \left|-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle] \Rightarrow$$

$$(-0.05i + 0.12) \left|-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (0.23i + 0.04) \left|-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle + (0.06i + 0.24) \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle + (0.08i - 0.06) \left|-\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\right\rangle$$

$$\sigma_4[(-0.05i + 0.12) \left|-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (0.23i + 0.04) \left|-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle + (0.06i + 0.24) \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle + (0.08i - 0.06) \left|-\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\right\rangle] \Rightarrow$$

$$(0.21i + 0.23) \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle + (0.23i + 0.05) \left|-\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\right\rangle + (0.03i + 0.25) \left|-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (0.22i + 0.21) \left|-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\sigma_5[(0.21i + 0.23) \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle + (0.23i + 0.05) \left|-\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\right\rangle + (0.03i + 0.25) \left|-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (0.22i + 0.21) \left|-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle] \Rightarrow$$

$$(-0.02 + 0.03i) \left|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle + (0.44 - 0.1i) \left|\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\right\rangle + (0.28i - 0.04) \left|\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (0.2 - 0.18i) \left|\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\sigma_6[(-0.02 + 0.03i) \left|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle + (0.44 - 0.1i) \left|\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\right\rangle + (0.28i - 0.04) \left|\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle + (0.2 - 0.18i) \left|\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle] \Rightarrow$$

$$[(-0.03i + 0.05)S_{3J}S_I + (-0.01i - 0.02)S_J S_I] \left|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$+ [(-0.66i - 0.15)S_{3J}S_I + (0.22i + 0.05)S_J S_I] \left|-\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\right\rangle$$

$$+ [(0.42 + 0.06i)S_{3J}S_I + (-0.14 - 0.02i)S_J S_I] \left|-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle$$

$$+ [(-0.27 - 0.3i)S_{3J}S_I + (-0.1i + 0.09)S_J S_I] \left|-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\right\rangle$$

Gerçel terimler alınırsa;

$$(0.05S_{3J}S_I - 0.02S_J S_I)|5\rangle + (0.05S_J S_I - 0.15S_{3J}S_I)|7\rangle \\ + (0.42S_{3J}S_I - 0.14S_J S_I)|4\rangle + (-0.27S_{3J}S_I + 0.09S_J S_I)|6\rangle$$

elde edilir.

$$g) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = |6\rangle \text{ durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar}$$

$$\sigma_0 \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \Rightarrow (-0.89) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_1(-0.89) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \Rightarrow (-0.89i) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (0.77i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.35) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_2[(-0.89i) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (0.77i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.35) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(0.54 + 0.54i) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (-1.23 + 0.16i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.25 + 0.6i) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.21 - 0.52i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_3[(0.54+0.54i) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (-1.23+0.16i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.25+0.6i) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.21-0.52i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(1.86 - 0.85) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.84i - 0.02) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.72i + 0.42) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (0.06 - 1.09) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_4[(1.86 - 0.85) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.84i - 0.02) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.72i + 0.42) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (0.06 - 1.09) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(1.88 - 0.58) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (1.15i - 2.08) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (1.4i - 1.06) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.28i - 0.44) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_5[(1.88 - 0.58) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (1.15i - 2.08) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (1.4i - 1.06) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.28i - 0.44) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(3.55 - 0.63i) \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (1.03 + 1.85i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.15 - 0.12i) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (0.32 + 0.83i) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_6[(3.55 - 0.63i) \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (1.03 + 1.85i) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.15 - 0.12i) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (0.32 + 0.83i) \left| \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$[(-5.34i - 0.96)S_{3J}S_I + (1.78i + 0.32)S_J S_I] \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
& + [(0.23i - 0.18)S_{3J}S_I + (-0.08i + 0.06)S_J S_I] \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \\
& + [(-1.55i + 0.53)S_{3J}S_I + (0.52i - 0.93)S_J S_I] \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \\
& + [(-0.48i + 1.25)S_{3J}S_I + (0.16i - 0.42)S_J S_I] \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle
\end{aligned}$$

Gerçel terimler alınırsa;

$$\begin{aligned}
& (0.32S_J S_I - 0.96S_{3J}S_I)|4\rangle + (0.06S_J S_I - 0.18S_{3J}S_I)|5\rangle \\
& + (0.53S_{3J}S_I - 0.93S_J S_I)|6\rangle + (1.25S_{3J}S_I - 0.42S_J S_I)|7\rangle
\end{aligned}$$

elde edilir.

$$h) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle = |7\rangle \text{ durumu ya da girişi için elde edilen sonuçlar}$$

$$\sigma_0 \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \Rightarrow (-0.89) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_1 (-0.89) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \Rightarrow (-0.77i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.35) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_2 [(-0.77i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.35) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(-0.61 + 0.47i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.52i - 0.21) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.54 + 0.54i) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_3 [(-0.61 + 0.47i) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.52i - 0.21) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.54 + 0.54i) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(0.85i - 0.65) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.72i + 0.28) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.56) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.66) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_4 [(0.85i - 0.65) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.72i + 0.28) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (-0.56) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle + (0.66) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle] \Rightarrow$$

$$(1.13i + 0.03) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + (1.79i - 1.01) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + (0.62i + 0.5) \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + (-0.22) \left| -\frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle$$

$$\sigma_5[(1.13i + 0.03)\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (1.79i - 1.01)\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + (0.62i + 0.5)\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (-0.22)\left|-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle] \Rightarrow$$

$$(-0.13 + 0.01i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (1.6 + 0.89i)\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + (0.55i - 0.69)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (0.42i)\left|\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle$$

$$\sigma_6[(-0.13 + 0.01i)\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + (1.6 + 0.89i)\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + (0.55i - 0.69)\left|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle + (0.42i)\left|\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle] \Rightarrow$$

$$[(0.2i)S_{3_J}S_I + (-0.07i)S_J S_I]\left|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$+ [(0.83 + 1.04i)S_{3_J}S_I + (-0.28 - 0.35i)S_J S_I]\left|-\frac{1}{2}\frac{3}{2}\right\rangle$$

$$+ [(-2.4i + 1.34)S_{3_J}S_I + (0.8i - 0.45)S_J S_I]\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$+ [(0.63)S_{3_J}S_I + (-0.21)S_J S_I]\left|-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle$$

Son olarak burada da gerçel terimler alınırsa;

$$(0.83S_{3_J}S_I - 0.28S_J S_I)|4\rangle + (1.34S_{3_J}S_I - 0.45S_J S_I)|6\rangle$$

$$+ (0.63S_{3_J}S_I - 0.21S_J S_I)|7\rangle$$

elde edilir.

Elde edilen sonuçları Çizelge 4.3.1 deki gibi özetleyebiliriz.

Çizelge 4.3.1. IS (I=1/2, S=3/2) INEPT ÇMR deneyinin CN mantık geçidi olarak sonuçları

$ IS\rangle$	INEPT
$\left \frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle =  0\rangle$	$ 0\rangle +  1\rangle +  2\rangle +  3\rangle$
$\left \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle =  1\rangle$	$ 0\rangle +  1\rangle +  2\rangle +  3\rangle$
$\left \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle =  2\rangle$	$ 0\rangle +  1\rangle +  2\rangle +  3\rangle$
$\left \frac{1}{2} - \frac{3}{2}\right\rangle =  3\rangle$	$ 0\rangle +  1\rangle +  2\rangle +  3\rangle$
$\left -\frac{1}{2} \frac{3}{2}\right\rangle =  4\rangle$	$ 4\rangle +  5\rangle +  6\rangle +  7\rangle$
$\left -\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle =  5\rangle$	$ 4\rangle +  5\rangle +  6\rangle +  7\rangle$
$\left -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right\rangle =  6\rangle$	$ 4\rangle +  5\rangle +  6\rangle +  7\rangle$
$\left -\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\right\rangle =  7\rangle$	$ 4\rangle +  6\rangle +  7\rangle$

Çizelge 4.3.1 den yararlanarak ve Kesim 2.4.2 deki denetimli-değil operatörünün tanımından hareket ederek yeni denetimli –değil geçidinin ( S’yi denetleyen I ) Dirac gösterimini,

$$\begin{aligned}
 CN = & |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |02\rangle\langle 02| + |03\rangle\langle 03| + |10\rangle\langle 11| + |10\rangle\langle 12| + |10\rangle\langle 13| \\
 & + |11\rangle\langle 10| + |11\rangle\langle 12| + |11\rangle\langle 13| + |12\rangle\langle 10| + |12\rangle\langle 11| + |12\rangle\langle 13| + |13\rangle\langle 10| \\
 & + |13\rangle\langle 11| + |13\rangle\langle 12|
 \end{aligned} \tag{4.3.9}$$

biçiminde oluşturabiliriz. Ondalık gösterimde bu mantık geçidini,

$$\begin{aligned}
 CN = & |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| + |4\rangle\langle 5| + |4\rangle\langle 6| + |4\rangle\langle 7| \\
 & + |5\rangle\langle 4| + |5\rangle\langle 6| + |5\rangle\langle 7| + |6\rangle\langle 4| + |6\rangle\langle 5| + |6\rangle\langle 7| \\
 & + |7\rangle\langle 4| + |7\rangle\langle 5| + |7\rangle\langle 6|
 \end{aligned} \tag{4.3.10}$$

olarak tanımlayabiliriz.

## 5. TARTIŞMA VE SONUÇ

ÇMR'ın küçük kuantum bilgisayarlarının işleyişi ile ilgili bir teknik olarak kullanımı, çok yakın bir geçmişe sahip bir düşünce olmuştur. Bu çerçevede, bütünüyle kuantum mekaniğinin yasalarıyla çalışan kuantum bilgisayarlarında çok-pulslu ÇMR deneylerinin, yeni mantık geçitleri olarak işlev yapabilecekleri düşüncesi ivme kazanmıştır.

Bu tezde, zayıf çiftlenimli IS ( $I=1/2$ ,  $S=1/2$  ve  $3/2$ ) spin sistemleri için bütünüyle kuantum mekaniksel yöntem olan çarpım operatör kuramı kullanılarak tanımlanan INEPT puls dizisinin, kuantum bilgisayarlarındaki denetimli-değil (CN) mantık geçidi olarak kullanılabilmesi çalışması yapılmıştır. Daha önce INEPT puls dizisinin, üniter matris dönüşümü tanımını kullanarak CN geçidi gibi kullanımını öneren çalışmalardan farklı bir biçimde, yine bütünüyle kuantum mekaniksel Dirac gösteriminden yararlanmak yoluyla ilk kez çarpım operatör kuramı çerçevesinde INEPT ÇMR deneyinin denetimli-değil mantık geçidi gibi davrandığı çalışmamda sunulmuştur.

Ayrıca, bu çalışmada, ilk kez DEPT ÇMR deneyinin de yine bütünüyle kuantum mekaniksel olarak, Dirac gösterimi ve çarpım operatör kuramı kullanılarak kuantum ve klasik bilgisayarlardaki Değil (NOT) geçidi gibi işlev yaptığı kanısına ulaşılmıştır.

**KAYNAKALAR**

Apaydın, F., 1991. Magnetik Rezonans, H.Ü. yayını, Ankara

Bahçeli, S., 1996. Çekirdek Magnetik Rezonansın Temelleri, Çeviri, Bizim Büro Basımevi, Ankara.

Berman, G. P., Doolen, G. D. and Tsifrinovich, V. I., 1998. Introduction to Quantum Computers, World Scientific, Singapore.

Braun, S., Kalinowski, H. O. and Berger, S., 1999. 150 and More Basic NMR Experiments, Wiley-VCH, 168-170p.

Chandrakumar, N. and Subramanian, S., 1987. Modern Techniques in High Resolution FT-NMR, Springer-Verlag, New York.

Chuang, I.L., Gershenfeld, N., Kubinec, M.G. and Lewng, D.W., 1998. Bulk Quantum Computation with Nuclear Magnetic Resonance: theory and experiment, Proc. R. Soc., Lond. A, **454**, 147-167p.

Doddrell, D.M., Pegg, D.T. and Bendall, M.R., 1982. Distortionless Enhancement of NMR Signals by Polarization Transfer, J. Magn. Reson., **48**, 323p.

Ernst, R.R., Bodenhausen, G. and Wokaun, A., 1987. Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimension, Clarendon Press, Oxford.

Fano, U., 1957. Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques, Rev. Modern Phys., **29**, 74p.

Farrar, T.C. and Becker, E.D., 1971. Pulse and Fourier Transform NMR, Academic Press, New York.

Gershenfeld, N. and Chuang, I.L., 1997. Science, **275**, 350p.

Homans, S.W., 1992. A Dictionary of Concepts in NMR, Oxford Science Publications Biophysical Techniques Series, Clarendon Press, Oxford, 373p.

Jones, J.A., Hansen, R.H. and Mosca, M., 1998. Quantum Logic Gates and Nuclear Magnetic Resonance Pulse Sequences, J. Magn. Reson., **135**, 353-360p.

Logan, T.M., 1999. Macromolecular NMR Spectroscopy, Bölüm 6, Springer – Verlag, Berlin.

Lindan, N., Barjat, H., Kupce, E. and Freeman R., 1999. How to exchange information between two coupled nuclear spins: the universal SWAP operation, Chem. Phys. Lett., **307**, 198-204p.

Morris, G. A. and Freeman, R., 1979. *J. Am. Chem. Soc.*, **101**, 760p.

Rogers, M.T., 2004. NMR Users Guide, <http://www.chemistry.msu.edu>.

Sarthour, R.S., deAzevedo, E.R., Bonk, F.A., Vidoto, E.L.G., Bonagamba, T.J., Guimaraes, A.P., Feritas, J.C.C. and Oliveira, I.S., 2003. Relaxation of coherent states in a two-qubit NMR quadrupole system, *Phys. Rev. A*, **68**, 022311-1-022311-7.

Sorensen, O. W. and Ernst, R.R., 1983. Elimination of Spectral Distortion in Polarization Transfer Experiments. Improvements and Comparison of Techniques, *J. Magn. Reson.*, **51**, 477p.

Tezel, Ö., Gençten, A., Tokatlı, A., Şahin, M. and Bahçeli, S., 2003. A Theoretical Investigation of Distortionless Enhancement by Polarization Transfer and Subspectral Editing with a Multiple Quantum Trap NMR Spectroscopy for  $CX_n$  Groups, *Act. Phys. Pol., A*, **104**, 503-511p.

Tokatlı, A., Gençten, A., Şahin, M., Tezel, Ö. and Bahçeli, S., 2004. Product operator descriptions of INEPT and RINEPT NMR spectroscopies for  $IS_n$  ( $I=1/2$ ,  $S=3/2$ ) spin systems, *J. Magn. Res.*, **169**, 68-72p.

Vandersypen, L.M.K., Yannoni, C.S. and Chuang, I.L., 2002. Liquid State NMR Quantum Computing, *Encyclopedia of Nuclear Magnetic Resonance*, **9**, 687-697p.

Yannoni, C.S., Sherwood, M.H., Miller, D.C., Chuang, I.L., Vandersypen, L.M.K. and Kubinec, M.G., 1999. Nuclear magnetic resonance quantum computing using liquid crystal solvents, *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 3563-3565p.

**ÖZGEÇMİŞ**

Adı Soyadı: Ali GÜLEÇ

Doğum Yeri: DENİZLİ

Doğum Tarihi: 17/06/1979

Medeni Hali: Evli

Eğitim ve Akademik Durumu:

Lise 1993-1996 Denizli Lisesi

Lisans 1996-2001 Gazi Üniversitesi Eğitim Fakültesi Fizik Bölümü

Yabancı Dil: İngilizce

İş Deneyimi:

2002- Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Araştırma Görevlisi