

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

79208

BİLGİSAYAR DESTEKLİ
NÜKLEER KUADRUPOL REZONANS
SPEKTROMETRESİ

Özgür AKÇALI

F.B.E. Fizik Anabilim Dalında
Hazırlanan

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Durul ÖREN

Y. Doç. Dr. Reha BAŞARAN

Y. Doç. Dr. Nurihan SAYGIN

İSTANBUL, 1998

79208

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
KISALTMA LİSTESİ	iii
ŞEKİL LİSTESİ	iv
ÇİZELGE LİSTESİ	v
ÖNSÖZ	vi
ÖZET	vii
ABSTRACT	viii
1. GİRİŞ	1
2. NÜKLEER KUADRUPOLE REZONANS TEORİSİ	4
3. ÖLÇÜ SİSTEMLERİ	11
3.1 Palslı Metod	12
3.2 Frekans Ölçüm Metodları	13
3.2.1 Süper rejeneratif osilatör	13
3.2.2 Sürekli Dalga Osilatörleri (Marjinal Osilatörler)	15
3.3 Modülasyon Teknikleri	16
4. DENEYSEL ÇALIŞMA	18
4.1 Osilatör (Robinson Tipi)	18
4.2 İki Yönlü Simetrik Zeeman Modulatörü	19
4.3 Bilgisayar Kontrollü Ölçümler	21
5. SONUÇLAR ve ÖNERİLER	24
KAYNAKLAR	25
ÖZGEÇMİŞ	26

KISALTMA LİSTESİ

ccw	Counter clock wise (Saat yönünün tersine)
cw	Clock wise (Saat yönüne)
FET	Field Effect Transistor (Alan Etkili Transistör)
fm	frekans modülasyonu
LABVIEW	(Laboratory Virtual Instrument Engineering Workbench)
NQR	Nükleer Kuadropol Rezonans
PSD	Phase Sensitive Dedektör (Faz Hassas Algılayıcı)
rf	radio frekans
SRO	Süper Rejeneratif Osilatör



ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
	1
Şekil 1.1 Kuadrupol yapıları simetrik olmayan çekirdekler	9
Şekil 2.1 Kuadrupol geçişlerin şematik gösterimi	11
Şekil 3.1 Temel rezonans devresi	11
Şekil 3.2 NQR Spektrometresi akış şeması	13
Şekil 3.3 Magnetizasyon vektörleri (üst hat) ve palstepkileri (alt hat)	14
Şekil 3.4 SRO'daki söndürme gerilimi ve sinyal zarfı	14
Şekil 3.5 (a) koherent olmayan, (b) kısmen koherent, (c) koherent biçimler	15
Şekil 3.6 Temel marjinal osilatör devresi	15
Şekil 3.7 Temel Robinson tipi marjinal osilatör devresi	16
Şekil 3.8 Kare dalga modülasyonu	17
Şekil 3.9 İki yönlü simetrik kare dalga modülasyonu	19
Şekil 4.1 Robinson (1982) tipi osilatör	20
Şekil 4.2 İki simetrik yönlü kare dalga devre şeması	20
Şekil 4.3 İki yönlü simetrik kare dalga devresinde gözlenen dalga şekilleri	21
Şekil 4.5 Spektrometre ön görüntüsü	22
Şekil 4.6 20°C'da alınan 1,4diklorobenzen NQR çizgi şekli	22
Şekil 4.7 33°C'da alınan 1,4diklorobenzen NQR çizgi şekli	23
Şekil 4.8 33°C'da alınan örneksiz ölçü	

ÇİZELGE LİSTESİ

	Sayfa
Çizelge 2.1 I spin durumundaki enerji eşitlikleri.....	10
Çizelge 2.2 Çizelge 2.1 'de verilen enerjilere karşılık gelen geçiş frekansları.....	10



ÖNSÖZ

Yıldız Teknik Üniversitesi Araştırma Fonu tarafından desteklenen bu çalışmada bilgi ve tecrübelerinden yararlandığım Prof. Dr. Durul ÖREN, Yrd. Doç. Dr. Reha BAŞARAN, Yrd. Doç. Dr. Süha AKÇİZ'e ve yardımlarından dolayı Sibel GÜRSES, Adnan ELMALI, Murat BEKEN'e teşekkür ederim.

Özgür AKÇALI



ÖZET

Bu tezin amacı, Nükleer Kuadropol Rezonans spektrometresinin geniş frekans aralıklarında yeni rezonanslar aranırken taranırken ve kalemli kaydedicilerden kaynaklanan ölçüm ve kalibrasyon problemlerini en aza indirmektir. Düşük gürültü seviyeli, geniş sinyal gürültü oranına sahip osilatörler ve daha düzgün çizgi şekli sağlayan modülasyon dalga teknikleri üzerine çalışan bir çok bilim adamı verimli sonuçlar elde etmişlerdir. Bizim çalışmamız temelde spektrometreyi kontrol etmekte ve veri kaydı yapmakta bir kişisel bilgisayar kullanımı üzerine olmuştur. Bilgisayara veri kaydı National Instruments LAB-PC 1200 veri alma kartı ile yapılmıştır ve veriler aynı şirketin LAB VIEW adlı yazılımı kullanılarak işlenmiştir.



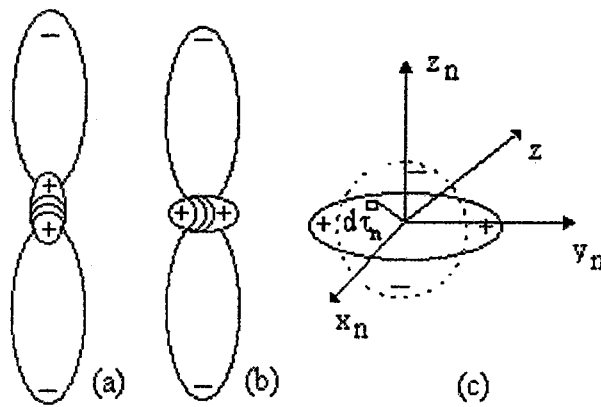
ABSTRACT

This research work aims to degrade the measurement and calibration problems in Nuclear Quadrupole Resonance spectroscopy originating from control difficulties over a wide range of frequencies when a new resonance is in search and as well pen recording. Efficient results have been achieved by many scientists whom work on oscillators which yield low noise figures, large signal to noise ratios and modulation wave shapes which results better line shapes. Our objective is mainly on controlling the spectrometer with a personal computer which will also be the recorder. Data input is made by a National Instruments LAB-PC 1200 data acquisition card and the incoming data is analyzed by LAB VIEW software of the same company.

1. GİRİŞ

Nükleer kuadrupol rezonans (NQR) spektroskopisi, magnetik rezonans spektroskopisinin bir dalı olmakla beraber radyo dalgalarının sıfır magnetik alanda madde tarafından absorblanması ile ilgilenir.

NQR'ın temelini anlamak için önce nükleer kuadrupol momentin yapısı dikkate alınır. Sonra da elektronik çevresi ile etkileşmesi incelenir. Çekirdeğin kuadrupol momenti, onun spininin ve spin bozulmasının bir sonucudur. Basit olarak başlamak gerekirse, bir molekül birkaç Å boyutunda bir yük bulutu ve çekirdekler de bunun içine yerleşmiş yaklaşık 10^{-4} Å boyutunda oldukça küçük yük dağılımı olarak değerlendirilebilir. Bu durumda sorulacak soru nükleer yük dağılımının nasıl bir simetriye sahip olduğudur. Nükleer kuadrupol rezonansa neden olan bütün çekirdeklerin, nükleer açısal momentum ile açıklanan bir magnetik momenti olduğundan, bütün quadrupolar çekirdeklerin bir silindirik simetri eksenine yani spin eksenine veya açısal momentumun tanımlandığı eksene sahip olduğu kabul edilir. $I \geq 1$ gibi bir çekirdek, küresel simetriye sahip olmayacak biçimde davranır. Bir başka deyişle spinin eksenine boyunca şekli bozulmuştur. Bir moleküle ilgili nükleer yük dağılımı basit bir modelde eksen boyunca uzatılmış veya sıkıştırılmış yükler düşünülürse ; (kuadrupol momentinin işaretine bağlı olarak) pozitif bir moment basık küresel (oblate) (Şekil 1.1b) ve negatif moment de yassı küresel (prolate) (Şekil 1.1a) bir şekle sahiptir.



Şekil 1.1 Kuadrupol yapıları simetrik olmayan çekirdekler.

Böyle yük dağılımlarının “kuadropol momentleri”

$$eQ = \int \rho_n (3z_n^2 - r_n^2) d\tau_n \quad (1.1)$$

ile tanımlanır; burada ρ_n , r_n uzaklıkta $d\tau_n$ hacim elemanı içindeki nükleer yük yoğunluğu, e elektronun yüküdür ve integral nükleer hacim üzerinden alınır (Şekil 1.1c). Küre için integral, z^2 'nin ortalama değeri $r^2/3$ 'e eşit olduğundan sıfırdır. Bununla beraber (1.1) eşitliğinin her iki tarafındaki birim yükten dolayı prolate küresel için sonlu ve pozitif ve oblate küresel için negatiftir (Q , r^2 boyutlarında ve nükleer alan büyüklüğündedir (10^{-24} cm^2)). Küresel bir yük dağılımında bastırma sonucu iki antiparalel dipol oluşur. Elektrik alan içinde her ikisi de kendilerini alan doğrultusuna getirmeye çalışan bir tork etkisi altında kalırlar, iki tork eşit ve zıt yönlü olduğundan net bir etki yoktur. Bununla beraber z eksenine simetrik elektrik alan gradienti içinde iki dipole etki eden tork eşit değildir. Böylece elektrik alan gradienti ve nükleer yük dağılımının küresel simetriden uzaklaşması (yani eQ 'dan) ile orantılı bir döndürücü net tork oluşur. Pozitif z yönündeki elektrik alan gradientini $(\partial E / \partial z) = -eq$, alırsak döndürücü net tork $|e^2 qQ|$ büyüklüğü ile orantılı olacaktır. Bütün quadrupolar çekirdeklerin açısall momentumu olduğundan, bu durum uygulanan bir dış magnetik alanın içine konulmuş bir nükleer magnetin presisyon hareketi (topaç hareketi; nükleer magnetik rezonansta kullanışlı bir modeldir) modeliyle kıyaslanabilir; alan, magneti paralelliğe getirmeye çalışır ve magnet de magnetik alan doğrultusunda ω frekansı ile presisyon yapan bir jiroskop gibi tepki verir. Bu benzerlikten hareketle, nükleer quadrupol, torka maksimum elektrik alan doğrultusunda $|e^2 qQ|/h$ ile orantılı bir frekansla presisyon yaparak cevap verir. Bununla beraber magnetik durumla arasında temelde önemli bir fark vardır çünkü q ve Q 'yu tanımlamakta farklı koordinat sistemi seçilmiştir; quadrupolar durumda presisyon frekansı yönelmeye bağlıken, magnetik durumda bütün yönelmeler için aynıdır. Bununla beraber, eğer nükleer spin ekseninin, nükleer açısall momentumun z doğrultusundaki bileşeni olan I_z tarafından kolaylıkla belirlenen bir veya daha fazla sabit yönelmeye ayarlanabileceği varsayılırsa bu pozisyonların her birinde bir presisyon frekansı olacaktır. Tabiki çekirdeğin bu presisyonu, nükleer açısall momentumu ve bu nedenle nükleer magnetik momenti de taşıyacağından, sonuç olarak nükleer kuadropol ile aynı frekansta ve fazda dönen z eksenine dik açılarda küçük bir magnetik alan oluşturacaktır. Şimdi lineer olarak titreşen

$$H = 2H_1 \cos \omega t \quad (1.2)$$

$$H = H(cw) + H(ccw)$$

olmak üzere, alanı iki dönen alana dönüştürülebilir.

$$\left. \begin{aligned} H(cw) &= H_1 \cos \omega t + iH_1 \sin \omega t \\ H(ccw) &= H_1 \cos \omega t - iH_1 \sin \omega t \end{aligned} \right\} \quad (1.3)$$

Böylece saat yönünde $H(cw)$ ve saat yönünün tersinde $H(ccw)$ dönen iki alan elde edilir. Böyle bir alan, örneğin alternatif akım gönderilen küçük bir bobinin içine koyulmasıyla elde edilir. Eş.1.3'ün çekirdekle aynı fazda presisyon yapan bileşeni, çekirdekle enerji alış verişi yapabilir. Böylece klasik olarak belli bir frekansta ortaya çıkan bir rezonans gözlenir ki, buna nükleer kuadrupol rezonans frekansı denir. Buraya kadar yazılanlar nükleer kuadrupol rezonansın klasik teori ile oldukça basitleştirilmiş anlatımını içerir fakat nükleer kuadrupol rezonans frekansları ve bunların büyüklükleri için nicel tanımlar, genellikle kuantum mekaniksel metodlarla türetilir. Bu yöntemlere değinmek için öncelikle nükleer elektrik kuadrupol ve elektrik alan gradientinin daha detaylı açıklaması gerekir. Matematik olarak ilk önce elektrostatik ortamdaki nükleer elektrik kuadrupolün enerji denklemi çıkarılıp bu tanım çözülür, daha sonra quantum mekaniksel operatör türetilip özvektör ve özdeğerleri bulunur.

2. NÜKLEER KUADRUPOL REZONANS'ın TEORİSİ

Bir atomun veya molekülün parçası olan quadropolar çekirdeği ve orijinden (elipsin iki odağının ortasından) r mesafede $\rho(r)$ yük yoğunluklu $dr = dx dy dz$ hacim elemanı ele alındığında, nükleer yük atomun veya molekülün elektronik yük dağılımının etkisi altındadır ve bu dr hacim elemanında $V(r)$ potansiyelini üretir. Çekirdeğin bu elektrostatik ortamdaki etkileşim enerjisi

$$E = \int \rho(r) V(r) dr \quad (2.1)$$

dir. $V(r)$ nükleer hacim üzerinde değişim gösterir. Bu değişim Taylor serisi yardımı ile tanımlanabilir.

$$V = V_0 + \sum_i x_i \left(\frac{\partial V}{\partial x_i} \right)_0 + \frac{1}{2} \sum_{ij} x_i x_j \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 + \dots \quad (2.2)$$

bu durumda enerjinin açık ifadesi de:

$$E = V(0) \int \rho(r) dr + \sum_i \left(\frac{\partial V}{\partial x_i} \right)_0 \int x_i \rho(r) dr + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 \int x_i x_j \rho(r) dr + \dots \quad (2.3)$$

olur. İlk terim Coulomb monopol enerjisidir ve nükleer yönelmeden bağımsız olduğu için inceleme açısından önemsizdir. İkinci terim dipol katkısıdır ve $\rho(r) = \rho(-r)$ yani kütle merkezi ile yük merkezi çakıştığından ve $\int x_i \rho(r) dr$ gibi integraller sıfır olduğundan ortadan kalkar. Bununla beraber tüm tek elektrik multipoller aynı nedenden ortadan kalkar. Yönelmeli enerji, asıl ilgilenilen üçüncü terim veya elektrik kuadropol terimdir.

Kuadropol enerjinin tam ifadesi;

$$E_Q = \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 \int x_i x_j \rho(r) dr \quad (2.4)$$

olur. Burada nükleer koordinatları içeren dokuz ve elektrostatik yük dağılımını içeren dokuz terim vardır. (2.4) eşitliği tensörel formda;

$$E_Q = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} \int \left(x_i x_j - \frac{1}{3} r^2 \delta_{ij} \right) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{6} \sum_{ij} V_{ij} \delta_{ij} \int r^2 \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.5)$$

yazılabilir ve son terim dönmeye bağlı olmadığından ihmal edilebilir. Bu aşamada

$$Q_{ij} = \int \left(3x_i x_j - r^2 \delta_{ij} \right) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.6)$$

kuadrupol moment ve bileşenleri

$$(\nabla \mathbf{E})_{ij} = -V_{ij} = - \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 \quad (2.7)$$

olan elektrik alan gradienti olmak üzere kuadrupol enerji;

$$E_Q = \frac{1}{6} \sum_{ij} Q_{ij} V_{ij} = -\frac{1}{6} \mathbf{Q} \nabla \mathbf{E} \quad (2.8)$$

bu iki vektörün çarpımı ile ifade edilir

Eğer alan gradienti kübik simetriye sahipse $V_{xx} = V_{yy} = V_{zz}$ Laplace denklemi ($\nabla^2 V = 0$) $V_{ii} = 0$ gerektirir ve bu nedenle enerji sıfırdır.

$\mathbf{Q}$ ve $\nabla \mathbf{E}$ vektörlerinin bazı özelliklerini belirtmek yararlı olacaktır. İlk olarak alan tamamen çekirdek dışındaki yükler tarafından üretildiğinden $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ ve $\nabla \times \mathbf{E} = 0$ 'a uyması gerekir.

Bu durumda $\nabla \mathbf{E}$ izsiz (köşegen üzerindeki elemanlarının toplamı sıfır) ve simetriktir. Bu nedenle bu tensörün sadece beş bağımsız değişkeni vardır. (2.6) eşitliğinin şekli $\mathbf{Q}$ 'nun da izsiz ve simetrik olduğunu göstermektedir. Bununla beraber nükleonlar çekirdeğe etkin bir silindirik simetri veren nükleer spin ekseninin (z eksen) ortalama doğrultusu etrafında presisyon hareketi yaptıkları için, eğer $i \neq j$ ise $Q_{ij} = 0$ ve $Q_{xx} = Q_{yy}$ olduğu görülür. Simetri ve yok olan iz

$Q_{xx} = Q_{yy} = -\frac{1}{2}Q_{zz}$ ifadesini verir. Böylece kuadrupol momenti ifade etmek için sadece tek bir parametre gereklidir ve yarı klasik bakış açısıyla enerji

$$E_Q = \frac{1}{6}Q_{zz}\left[V_{zz} - \frac{1}{2}(V_{xx} + V_{yy})\right] \quad (2.9)$$

şeklinde yazılabilir.

Hamiltonyenin kuantum mekaniksel tanımını elde etmek için sadece (2.6) eşitliğindeki $\rho(\mathbf{r})$ 'yi kuantum mekaniksel operatörü ile değiştirmek yeterli olacaktır:

$$H_Q = \frac{1}{6} \sum_{ij} V_{ij} Q_{ij}^{(op)} \quad (2.10)$$

Enerjiyi hesaplamak için H_Q 'nin $|Im\rangle$ nükleer durumları arasında matris elemanlarını hesaplamak gerekir:

$$E_Q = \frac{1}{6} \sum_{ij} V_{ij} \langle Im | Q_{ij}^{(op)} | Im' \rangle \quad (2.11)$$

burada I toplam açısal momentum ve nükleer magnetik kuantizasyon m de $(2I+1)$ değer alabilen z bileşenidir. Çekirdeğin temel durumu ile ilk uyarılmış seviyesi arasındaki enerji farkı E_Q 'ya kıyasla çok büyük olduğundan, temel durumun üstündeki tüm durumlar ile diğer tüm nükleer kuantum sayıları ihmal edilebilir ve I 'daki matris elemanları diagonaldir.

Eş.2.11 değerlendirilirken Wigner-Eckhart teoremi (Slichter,1984) (bütün izsiz ve simetrik ikinci derece (rank) tensörlerin matris elemanları orantılıdır.) kullanılırsa

$$\langle Im | Q_{ij}^{(op)} | Im' \rangle = C \langle Im | \frac{3}{2}(I_i I_j + I_j I_i) - \delta_{ij} I^2 | Im' \rangle \quad (2.12)$$

ki burada C sağdaki operatör Q_{ij} ile aynı simetriye sahip olduğundan m, m', i, j 'den bağımsız bir sabittir (Clebsch Gordon katsayısı (Slichter,1984)). C 'yi $m = m' = I$ ve $i = j = z$ olan matris elemanları cinsinden ve e elektron yükü ile yeni bir Q skaler büyüklüğü tanımlanarak

$$eQ = \langle II | Q_{ij}^{(op)} | II \rangle \quad (2.13)$$

ile ifade edilebilir ve

$$C = eQ/I(2I - 1) \quad (2.14)$$

olarak bulunur.

Q çekirdeğin kuadrupol momentidir ve deneysel olarak ölçülebilir bir niceliktir. Böylece kuadrupol Hamiltonyen

$$H_Q = \left\{ eQ/6I(2I - 1) \right\} \sum_{ij} V_{ij} \left[\frac{3}{2} (I_i I_j + I_j I_i) - \delta_{ij} I^2 \right] \quad (2.15)$$

şeklini alır. Eğer elektrik alan gradientinin temel eksen sistemi $i \neq j$ için $V_{ij} = 0$ olacak şekilde dönüştürülür ve Laplace denklemi göz önüne alınırsa;

$$H_Q = \left\{ eQ/4I(2I - 1) \right\} \left[V_{zz} (3I_z^2 - I^2) + (V_{xx} - V_{yy}) (I_x^2 - I_y^2) \right] \quad (2.16)$$

denklemini elde edilir.

Temel eksen sistemini dönüştürmek herhangi bir değişikliğe neden olmaz çünkü enerji, seçilen koordinat sisteminden bağımsız olmalıdır. Eşitlik (2.16), potansiyelin türevlerini karakterize etmekte sadece iki parametrenin önemini vurgular. Bunlar q ve η 'dur. Bu iki büyüklük ve temel eksenleri belirtmek için gerekli üç Euler açısı elektrik alan gradientinin tam tanımını sağlar.

$$eq \equiv V_{zz}, \eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \quad (2.17)$$

Tanıma göre eq niceliği elektrik alan gradient tensörünün şiddeti en büyük olan bileşenidir ve η elektrik alan gradientinin aksenal simetriden uzaklaşmasını ölçen asimetri parametresidir. Eksenler $(|V_{zz}| \geq |V_{yy}| \geq |V_{xx}|)$ şeklinde seçilirse $1 \geq \eta \geq 0$ olacaktır.

$$H_Q = \{e^2 qQ/4I(2I-1)\} \left[(3m_z^2 - I^2) + \eta(I_x^2 - I_y^2) \right] \quad (2.18)$$

$e^2 qQ$ “kuadropol çiftlenim sabiti (Quadrupole Coupling Constant)” olarak bilinir. Eğer nükleer spin sayısı $I=0$ ise tercih edilen bir yönelme olmadığı için kuadropol moment gözlemek imkansızdır ve $I=1/2$ ise spinin tersine dönmesi nükleer yük dağılımında yeni bir yönelmeye karşılık gelmez ve böylece elektrostatik enerjide bir değişim olmayacağı için kuadropol moment gözlenemez.

Bu aşamada I_+ ve I_- operatörleri kullanılarak eşitlik (2.18)’de $(I_x^2 - I_y^2) = \frac{1}{2}(I_+^2 - I_-^2)$ eşitliği yardımıyla

$$\langle \text{Im} | H_Q | \text{Im}' \rangle = \{e^2 qQ/4I(2I-1)\} \left\{ \left[3m^2 - I(I+1) \right] \delta_{mm'} + \frac{1}{2} \eta \left[(I \mp m)(I \pm m - 1)(I \pm m + 2) \right]^{1/2} \delta_{m \pm 2, m'} \right\} \quad (2.19)$$

η arttıkça nükleer öz durumların karışma derecesi artar ve $\eta = 0$ ’da karışma sıfırdır. Genel olarak, genel özdeğer probleminin çözümü zordur, özellikle yarı integral spinlerde $(I+1/2)$ $\Delta m = 2$ ile durumlar karışmıştır. Bununla beraber ilk integral spin $(I+1)$ olan $I = 1$ durumunda Hamiltonyen matrisi $A = (e^2 qQ/4I(2I-1))$ olmak üzere, matris elemanları;

$$H_Q = \begin{pmatrix} A & 0 & \eta A \\ 0 & -2A & 0 \\ \eta A & 0 & A \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

olur ve buradan elde edilen,

$$(2A + E_m) \left[(A - E_m)^2 - A^2 \eta^2 \right] = 0 \quad (2.21)$$

denkleminin çözümleri;

$$\begin{aligned} E_{+1} &= \frac{1}{4}e^2 qQ(1+\eta) \\ E_{-1} &= \frac{1}{4}e^2 qQ(1-\eta) \\ E_0 &= -\frac{1}{2}e^2 qQ \end{aligned} \quad (2.22)$$

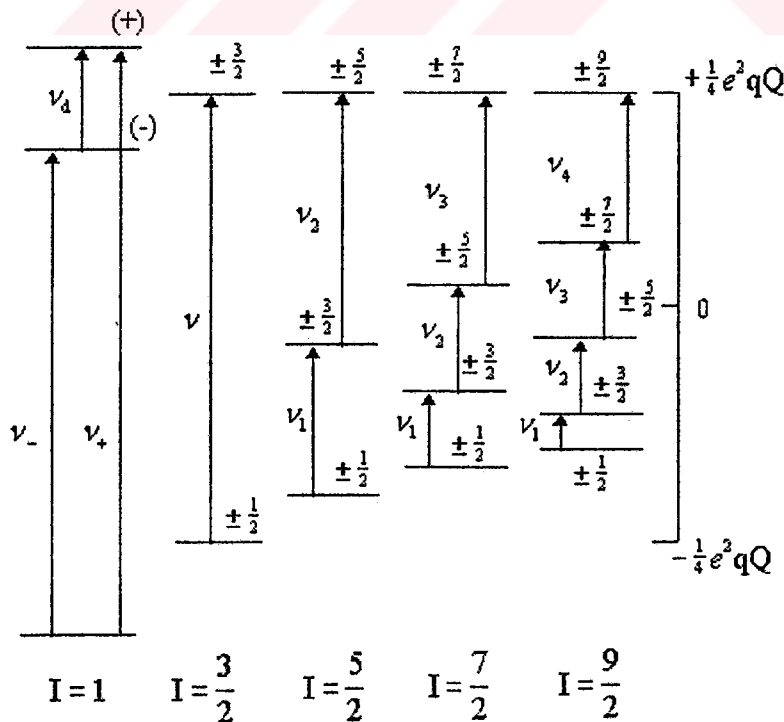
$h\nu = \Delta E$ kuantum durumu üç geçiş frekansı verir:

$$\nu_{\pm} = \frac{3}{4}(e^2 qQ/h)(1 \pm \frac{1}{3}\eta) \quad , \quad \nu_{\pm} = \frac{1}{2}(e^2 qQ/h)\eta \quad (2.23)$$

$\eta = 0$ olduğunda E_1 ve E_2 dejenere olur ve sadece frekansı

$$\nu_{0 \rightarrow \pm 1} = \frac{3}{4}(e^2 qQ/h) \quad (2.24)$$

olan bir geçiş mümkündür. $I=1, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$ geçişleri (Şekil 2.1)ve bunlara karşılık gelen enerjiler (Çizelge 2.1) ve bu enerjilerdeki geçiş frekansları (Çizelge 2.2) aşağıda verilmiştir.



Şekil 2.1 Kuadrupol geçişlerin şematik gösterimi.

Çizelge 2.1 I spin durumundaki enerji eşitlikleri.

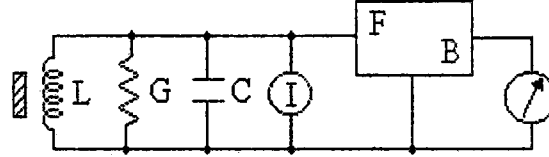
I	Denklem (Enerji)
$\frac{3}{2}$	$E^2 - 3\eta^2 - 9 = 0$
$\frac{5}{2}$	$E^3 - 7(3 + \eta^2)E - 20(1 - \eta^2) = 0$
$\frac{7}{2}$	$E^4 - 42(1 + \eta^2/3)E^3 - 64(1 - \eta^2) + 105(1 + \eta^2/3) = 0$
$\frac{9}{2}$	$E^5 - 11(3 + \eta^2)E^3 - 44(1 - \eta^2)E^2 + \frac{44}{3}44(3 + \eta^2)E + 48(3 + \eta^2)(1 - \eta^2) = 0$

Çizelge 2.2 Çizelge 2.1’de verilen enerjilere karşılık gelen geçiş frekansları.

I	Denklem (Frekans)
$\frac{3}{2}$	$\nu_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2 Qq}{h} \right) \eta \left(1 + \frac{\eta^2}{3} \right)^{\frac{1}{2}}$
$\frac{5}{2}$	$\nu_2(\pm \frac{5}{2} \rightarrow \pm \frac{3}{2}) = \left(\frac{6}{20} \right) \left(\frac{e^2 qQ}{h} \right) (1 - 0.2037\eta^2 + 0.162\eta^4 + \dots)$
	$\nu_1(\pm \frac{3}{2} \rightarrow \pm \frac{1}{2}) = \left(\frac{3}{20} \right) \left(\frac{e^2 qQ}{h} \right) (1 + 0.0926\eta^2 - 0.634\eta^4 + \dots)$
$\frac{7}{2}$	$\nu_3(\pm \frac{7}{2} \rightarrow \pm \frac{5}{2}) = \left(\frac{3}{14} \right) \left(\frac{e^2 qQ}{h} \right) (1 - 0.2014\eta^2 - 0.5278\eta^4 + \dots)$
	$\nu_2(\pm \frac{5}{2} \rightarrow \pm \frac{3}{2}) = \left(\frac{2}{14} \right) \left(\frac{e^2 qQ}{h} \right) (1 + 15.867\eta^2 + 52.052\eta^4 + \dots)$
	$\nu_1(\pm \frac{3}{2} \rightarrow \pm \frac{1}{2}) = \left(\frac{1}{14} \right) \left(\frac{e^2 qQ}{h} \right) (1 + 50.8965\eta^2 - 101.29\eta^4 + \dots)$
$\frac{9}{2}$	$\nu_4(\pm \frac{9}{2} \rightarrow \pm \frac{7}{2}) = \left(\frac{4}{24} \right) \left(\frac{e^2 qQ}{h} \right) (1 - 0.0809\eta^2 - 0.0043\eta^4 + \dots)$
	$\nu_3(\pm \frac{7}{2} \rightarrow \pm \frac{5}{2}) = \left(\frac{3}{24} \right) \left(\frac{e^2 qQ}{h} \right) (1 - 0.1857\eta^2 - 0.1233\eta^4 + \dots)$
	$\nu_2(\pm \frac{5}{2} \rightarrow \pm \frac{3}{2}) = \left(\frac{2}{24} \right) \left(\frac{e^2 qQ}{h} \right) (1 - 1.3381\eta^2 + 11.724\eta^4 + \dots)$
	$\nu_1(\pm \frac{3}{2} \rightarrow \pm \frac{1}{2}) = \left(\frac{1}{24} \right) \left(\frac{e^2 qQ}{h} \right) (1 + 9.0333\eta^2 - 45.691\eta^4 + \dots)$

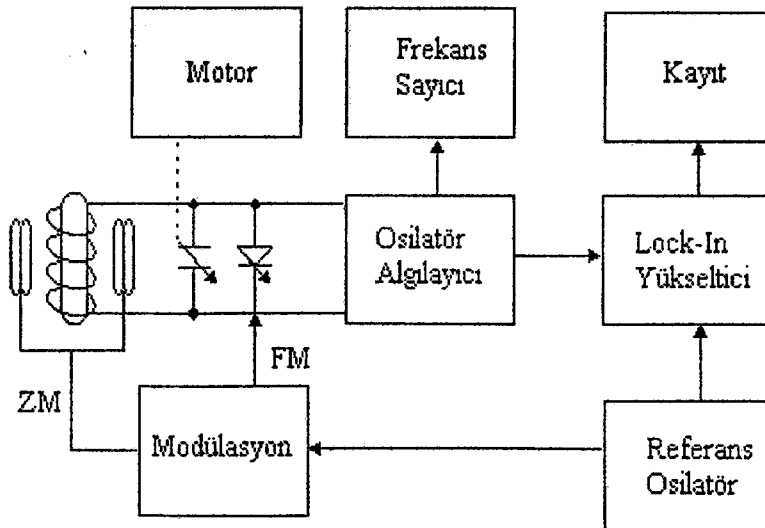
3. ÖLÇÜ SİSTEMLERİ

En basit nükleer rezonans devresi, bir rezonans devresini (L, C, ve G yükü) kendi doğal frekansında süren bir sabit akım jeneratörü olarak tanımlanabilir. (Şekil 3.1) Nükleer rezonans absorpsiyonu, şönt empedansını değiştirir ve böylece üzerinde bir gerilim oluşturur. Bu değişim band genişliği B ve gürültü şekli (noise figure) F olan bir alıcı tarafından algılanır.



Şekil 3.1 Temel rezonans devresi.

Böyle bir spektrometrenin temel bileşenleri Şekil 3.2’de gösterilmiştir. Örnek, osilatör-algılayıcının tank bobini içine yerleştirilmiştir ve osilatör frekansı ayarlı bir kondansatöre bağlı bir motor tarafından değiştirilir. Absorpsiyon işlevini modüle etmek için osilatörü modüle etmek veya örneğe değişken zayıf bir magnetik alan uygulamak gereklidir. Rezonans durumu böylelikle, radyo frekans osilatörünün genlik modülasyonu şeklinde görülür. Demodülasyondan sonra sinyal bir dar band yükselticiye ve faz duyarlı algılayıcıya (lock-in yükseltici) sürülür ve kaydedilir.



Şekil 3.2 NQR Spektrometresi akış şeması.

Bununla beraber NQR çalışmalarında yapılmak istenilen ölçüye göre iki farklı aygıtsal metod kullanılır. Öncelikle yapılan çalışma ile doğrudan ilgisi olmayan palslı metodlar incelenecektir. Bu metod sistemin radyo frekans gücü yarılmalarına ne şekilde tepki verdiğini, yani çekirdeğin relaksasyon özelliklerini belirlemekte kullanılır ki bu grup palslı teknikleri kullanır. Sonra da deneyin temel amacı frekansları ölçmek ve eğer mümkün olursa çizgi şekillerini mevcut maksimum duyarlılıkla belirlemek olan grup ki, bu grupta en sık kullanılan algılayıcılar sürekli dalga osilatörü ve süper rejeneratif osilatör (SRO), incelenecektir.

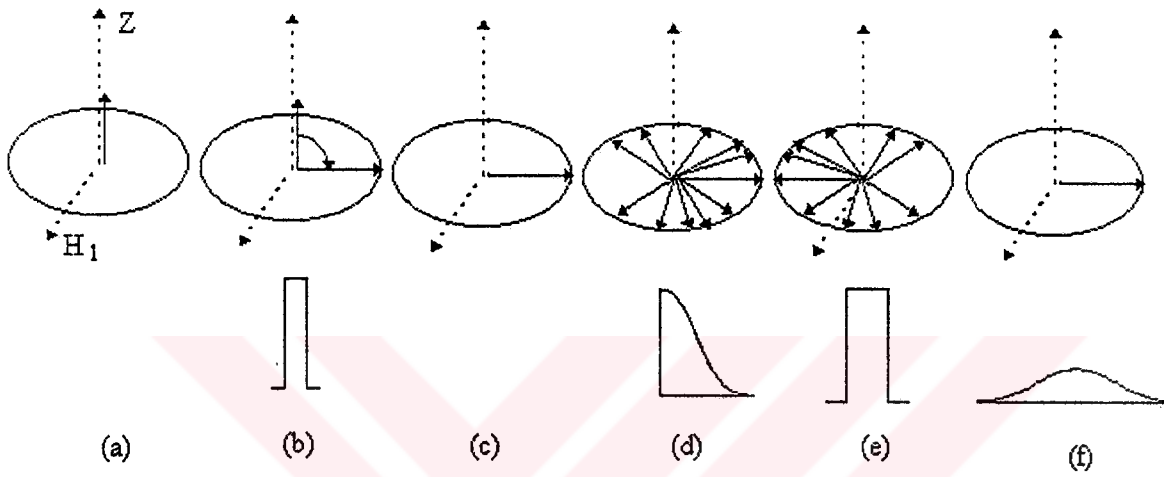
Nükleer magnetik rezonansın tersine NQR frekansları quadrupolar çekirdeği içeren molekülün doğasına bağlıdır ve birkaç yüz kHz'den 1000 MHz'in üzerindeki değerlere kadar çıkabilir. Bu 13 oktavlık bölge tek bir spektrometre tarafından algılanamayacağı için aygıt çalışılan frekans aralığına göre tasarlanır. 5-10 MHz aralığında sınırlı (limited) osilatör türü olan marjinal osilatör kullanılır. 10 MHz'den 700 MHz'e kadar olan bölgede, dar frekans aralıkları taranacaksa, rf köprüsü kullanılabilirse de özellikle geniş frekans kaymaları ile tarama yapılacaksa, süper rejeneratif osilatör kullanılır.

3.1 Palslı Metod

Bu yöntemde radyo frekans gücü vurulandırılır ve sinyaller sessiz durumlarda alınır. Bu teknik kuadropol olgusuna 1954'de girmiş ve oldukça kullanılır bir teknik olmuştur.

Pals tekniği çekirdeklerin relaksasyon süreleri hakkında diğer metodlara göre daha güvenilir sonuçlar verir. Kuadropol sistemin davranışını, ilk olarak elektrik alan gradientinin maksimum bileşeni yönünde uygulanan M magnetizasyonu ile nükleer magnetik rezonansa benzeterek açıklayabiliriz. Nükleer magnetik rezonansa, bu uygulanan H_0 magnetik alanına (z 'ye paralel kabul edilen; (Şekil 3.3a)) karşılık gelir. Bu yöntemde aynı bobine şiddetli radyo frekans palsı uygulanır ki bu uygulanan radyo frekans ile orantılı olarak z eksenini etrafında dönen H_1 (Şekil 3.3b) magnetik alana neden olur. Bu durumda nükleer magnetizasyon H_1 etrafında $\gamma_n H_1$ oranı ile ve tabiki z eksenini etrafında $\gamma_n H_0$ oranıyla presisyon yapar, burada γ_n jromagnetik oran olarak adlandırılır ve açısal frekansın alana oranı olarak tanımlanır. z etrafında uygulanan radyo frekans ile dönen referans çatısında nükleer magnetizasyon H_1 etrafında döner. Pals magnetizasyonu 90° döndürmeye yetecek bir süre uygular ve sonra kesilir (Şekil 3.3c). Sistem kendi haline bırakıldığında M magnetizasyonu z eksenini etrafında dönmeye devam eder fakat yoğun durumlarda çeşitli etkileşmeler olduğundan sistem kendi halinde kalmaz ve M

değişebilir. Örneğin H_0 alanının bozulması (inhomogenities) veya sistemde farklı çekirdek grupları bulunması nedeniyle farklı oranlarda presisyon yapar. Dönen çerçevede magnetizasyon vektörleri de dönmeye başlarlar ve ilk pals ile verilen 90° 'lik magnetizasyon bozulur. Yapılan deney biraz değiştirilip önce τ süresince bir pals(90° pals) ve sonra 2τ süreli ikinci pals(180° pals) uygulanır. Dönü diagramı H_1 180° döner (Şekil 3.3e), böylece dönü yok olur ve orjinal magnetizasyon (Şekil 3.3c) tekrar kurulur. Bu durumda magnetizasyon kaybı olmaz. Eğer kayıp çok küçükse 2τ sürede tekrar inşa edilen magnetizasyon bir eko sinyali üretir (Şekil 3.3f).

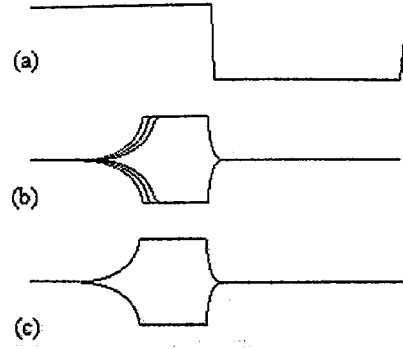


Şekil 3.3 Magnetizasyon vektörleri (üst hat) ve palstepkileri (alt hat)

3.2 Frekans Ölçüm Metodları

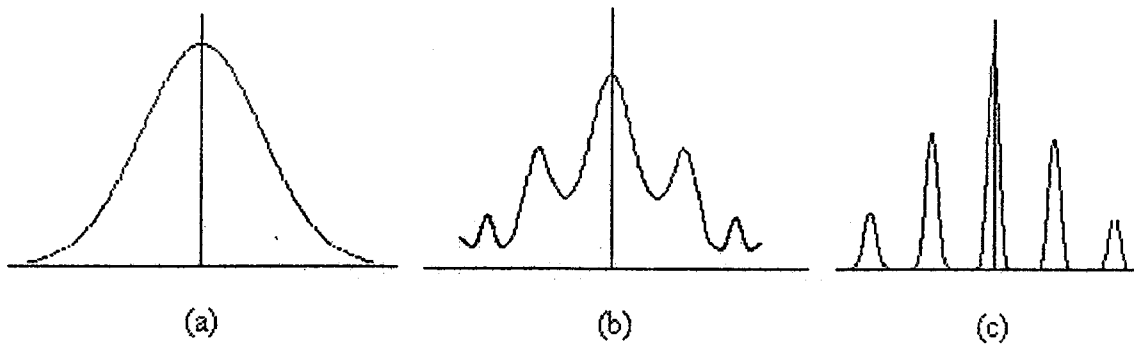
3.2.1 Süper rejeneratif osilatör

Süper rejeneratif osilatör , Dehmelt ve Kruger tarafından 1950'de, katılarda NQR'ın belirlenmesinde ilk devre olarak kullanılmıştır. Katılarda yapılan çalışmaların büyük bir çoğunluğunda bu tip osilatörler kullanılmıştır. Bunun nedeni yapılması en kolay ve en ucuz radyo frekans spektrometresi oluşudur fakat bunun yanısıra kontrol edilmesi de çok güçtür ve dar bir frekans aralığında kuvvetli sinyallerin algılanmasına olanak tanır. Bu nedenle, SRO.'yu genel amaçlı ve geniş frekans aralıklı bir spektrometre yapmak için, otomatik kazanç kontrolü ve otomatik frekans kalibrasyonu gibi bazı geliştirmeler yapmak gereklidir.



Şekil 3.4 SRO'daki söndürme gerilimi ve sinyal zarfı.

Süper rejeneratif osilatör (SRO) aralıklarla çalışır, radyo frekans katarı belirli aralıklarla bir iç veya dış söndürme mekanizması tarafından uyarılır, bu söndürme uyarı frekansı genellikle radyo frekansın yüzde veya binde biri aralığındadır. Böylece Şekil 3.4'deki gibi bir radyo frekans zarfı oluşur. Şekil 3.4a'da söndürme dalga şeklini gösterir ve burada radyo frekansı logaritmik olarak adlandırılan modda çalışır ki bu durumda radyo frekansı limit değerine söndürme başlamadan ulaşır. Şekil 3.4b inkoherant modu gösterir ki burada ikincisi gürültü tarafından başlatılmadan ilk radyo frekansı tamamen yok olur. Şekil 3.4c'de ikinci sinyal öncekinin izi tarafından oluşturulur. SRO'de söndürme sinyalinin t_{off} süresine bağlı olarak çeşitli koherent durumlar gözlenebilir. Şekil 3.5'de çeşitli t_{off} sürelerine karşılık alınan sinyaller görülmektedir. t_{off} süresi kısaltıldıkça osilatör koherent duruma doğru gider ve f_0 temel frekansı civarında f_q söndürme frekansına bağlı olarak yan bandlara (sideband) ayrılır.

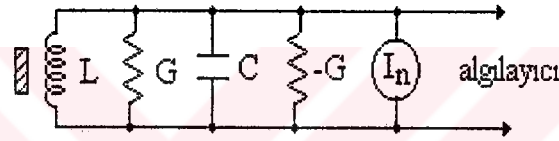


Şekil 3.5 (a) koherent olmayan, (b) kısmen koherent, (c) koherent biçimler.

3.2.2 Sürekli Dalga Osilatörleri (Marjinal Osilatörler)

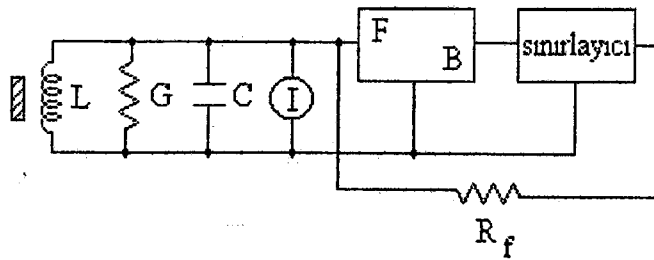
Bir sürekli dalga osilatörü, osilasyonlar sönümlü olmadığı için süper rejeneratif osilatörden daha basit bir ayardır. Rezonans durumunda radyo frekans adsorbsiyonunu (hem uyarı hem de belirleyen osilatörde) sistem kendi kendine belirleyebilir.

Bir osilatör, kendi girişini tayin etmek için, etkili pozitif geri beslemeli bir yükseltici olarak ele alınabilir ve böylece sürekli osilatör olarak kalır. Osilasyonları tutmak için yeterli geri besleme olmadığı zaman devre, tank devresinin dış direnç empedansındaki değişikliklere çok duyarlıdır. Osilatör frekansı quadropol rezonans frekansına eşit olduğu zaman, osilatörün kazanç seviyesi düşer ve bu değişim algılanır. Bu tip osilatörlere marjinal osilatör denir. Tipik bir devre (Şekil 3.6) Pound ve Knight (1950) tarafından gerçekleştirilmiştir.



Şekil 3.6 Temel marjinal osilatör devresi.

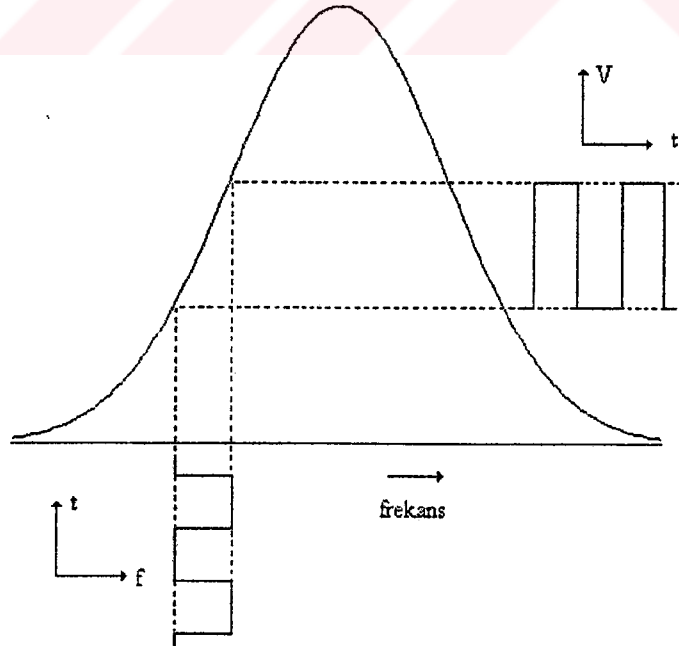
Farklı bir geri besleme düzenlemesine sahip bir osilatör de (Şekil 3.7) Robinson (1959,1982) tarafından tasarlanan sınırlanmış bir osilatördür. Bu ikinci bir dalga kullanır. Bu dalga sınırlı bir çıkış verir ve böylece sabit bir geri besleme elde edilir. Bu devre, duyarlılıkla bir geri besleme düzeltilmesine gerek olmaksızın geniş bir frekans aralığında devamlı kaldığı için avantajlıdır. Rezonans frekansı daha rahat doyurulan bu tip osilatörler daha iyi çizgi şekilleri sağlarlar.



Şekil 3.7 Temel Robinson tipi marjinal osilatör devresi.

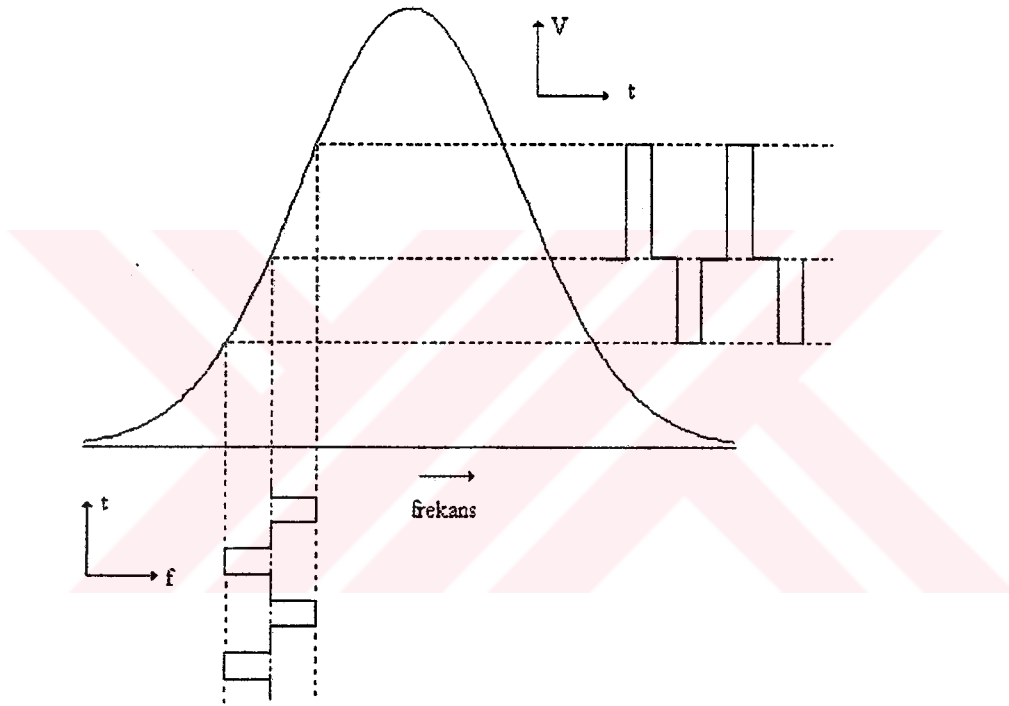
3.3 Modülasyon Teknikleri

NQR sinyallerinin algılanmasında iki farklı modülasyon tekniği kullanılır. Bunlar frekans modülasyonu (fm) ve Zeeman modülasyonudur. Spektrometrenin osilatör frekansı absorpsiyon çizgisi etrafında ileri geri hareket ettikçe, kare dalga ile gerçekleştirilen frekans modülasyonu, dar band yükselticisi ve modülasyon frekansında çalışan bir faz duyarlı algılayıcı (P.S.D.) tarafından takip edilen bir rf genlik algılayıcısı ile algılanabilir genlik modülasyonu oluşturur. Bununla beraber, eğer, örnek toz halinde ise iç rezonanslar nedeniyle NQR frekansının algılanması zordur ve bu durumda Zeeman modülasyonu tekniğiyle ölçü alınması sadece NQR frekansları modüle edileceğinden avantajlı hale gelir. Seçilen modülasyon yönteminin yanı sıra sistemi modüle etmekte kullanılan dalga şekli de önem taşır. Pratikte, osilatör frekansını modüle etme çabası sonucu oluşan ilk genlik modülasyonu en iyi durumda taban çizgisinde (base line) kaymaya ve en kötüsü de yükseltici algılayıcı sistemini tamamen kullanılamaz hale gelmesine neden olur. Bu etkileri ortadan kaldırmak için genellikle zayıf modülasyon kullanılır, ki bu da çizgi şekli tarafından üretilen sinyalin mümkün olandan maksimumdan daha az olmasına neden olur. Modülasyon dalga şekli olarak kare dalga kullanılarak alınan ölçülerde çizgi şekli absorpsiyon çizgisinin türevidir (Şekil 3.8).



Şekil 3.8 Kare dalga modülasyonu.

Diğer bir modülasyon dalga şekli ise iki yönlü simetrik (bidirectional) kare dalgadır (Şekil 3.9). Bu tip bir dalga şekli kullanıldığında, modülasyon frekansında rf algılayıcının çıkışında ilk genlik modülasyonuna karşılık gelen bileşeni sıfırlanmış olur. Bu dalga şekli Zeeman modülasyonunda kullanılan temel dalga şeklidir. Zeeman modülasyon tekniğinde ise spektrometrenin radyo frekans devresine bir bağlantı veya ayarlama gerekmez ve modülasyonun frekans ölçümleri üzerinde herhangi bir etkisi yoktur. Bunun yanı sıra elde edilen çizgi şekli türev değil absorpsiyon çizgisinin kendisidir. Zeeman modülasyonu ile daha çok yarı integral spinli çekirdeklerle çalışılır çünkü düşük alan etkisi çizgileri genişletmekte yeterlidir ve bu nedenle rezonansın absorpsiyon yoğunluğunu (şiddetini) modüle eder.



Şekil 3.9 İki yönlü simetrik kare dalga modülasyonu.

4. DENEYSEL ÇALIŞMA

Belirli bir rezonans spektrometrenin hassasiyeti, tank devresinin bobininin Q (kalite faktörü) ve onun doluluk faktörüne ve osilatörün gürültü sıcaklığı ve doyuma ulaşmak için bobine sürdüğü yeterli rf gerilimi sürebilme kapasitesine bağlıdır. Bu, son iki parametre çelişir çünkü düşük gürültülü devreler yüksek rf gerilimleri sağlayamazlar.

Süper rejeneratif osilatörler yüksek gerilimler sağlayabilirse de böyle oldukça lineer olmayan bir durumda çalışan bir devrenin düşük gürültü seviyeleri sağlaması zordur. Marjinal osilatör, eğer döngü kazancı bire yakınsa ve geri besleme devresi kazancı artan genlikle orantılı olarak düşerse düşük gürültü seviyeleri sağlar. Bununla beraber geniş bir seviye ve frekans aralığında bunu sağlamak için sürekli kalibrasyon gerektirir. Robinson'un 1959'da geliştirdiği osilatör devresi diğer osilatörlere göre bu dezavantajlara sahip olmamasına karşın, gerek sinyalde gerekse gürültüde önemli bir yükseltme yapmaz. Sonuç olarak, bir düşük gürültü algılayıcısı gerektirir.

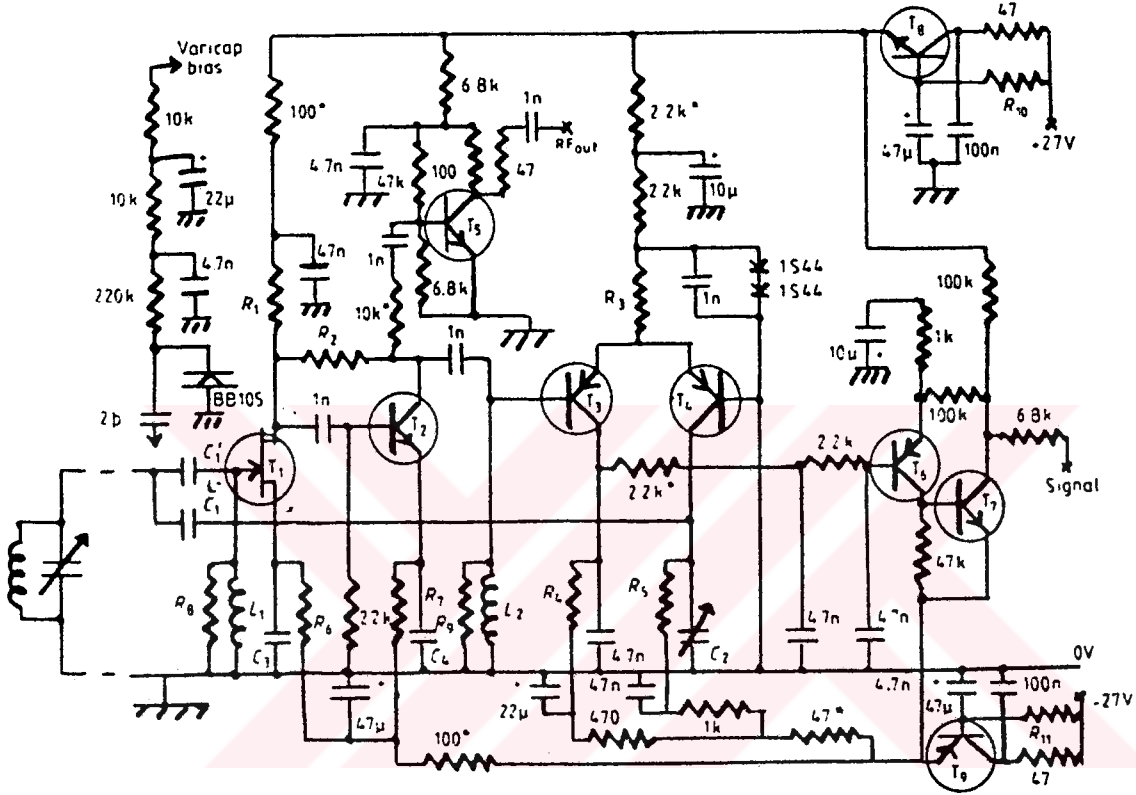
Frekans modülasyonu yeni rezonansların arandığı geniş tarama bölgelerinde base line kayması ve sahte sinyallere yol açar. İkinci harmonik algılamalı iki yönlü simetrik Zeeman modülasyonu (Verwieck ve Cornwell, 1961) bu yaklaşımın dışındadır. Bunun yanı sıra, böyle bir modülasyon tekniği sürekli dalga osilatörü ile kullanıldığında oldukça düzgün bir spektrum elde edilebilir. Bu tip modülasyon teknikleri Watkins ve Pound (1952) ve Robinson (1980b) tarafından uygulanmıştır.

4.1 Osilatör (Robinson Tipi)

Osilatör devresinde sınırlayıcı olarak bir çift (long-tailed) bipolar transistör kullanılır ve bu transistörler kısmen, yeterli algılayıcı olarak da çalışırlar. Bununla beraber, ayar devresinin yüklenmesini ve Q 'nun azalmasını önlemek için sınırlayıcının önünde FET girişli, geniş bant aralıklı, düşük gürültülü yükseltici kullanılır. Bu yükselticinin kapasitif giriş admitansı tank devresinin elektronik devreye oldukça zayıf ilişkilenmesini sağlar. Sonuç olarak tank devresinden elektronik devreyle çok küçük bir akım akar ve eğer ayar kondansatörü bobine yeterince yakınsa bu Q 'ya çok az etki eder ve etkin doldurma faktörünü azaltır.

Şekil 4.1 böyle bir osilatör devresinin temel şeklini göstermektedir. T_1 ve T_2 eşlenik olmayan geniş band yükseltici çiftini oluşturur ve eğer, g_1 T_1 'in, T_2 'nin kollektör base kapasitansı

tarafından belirlenen ortak iletkenliği olmak üzere kazanç $A = g_1 R_2$ dir. Bu yükselticinin düşük çıkış empedansı vardır ve T_3 T_4 çiftini sürer. Eğer T_3 'ün base'ine gelen rf gerilimi 100 mV'u aşarsa T_4 'den geçen akım açılıp kapanır. Bu kırılan akımın bir kısmı (C_1 ve C_2 tarafından belirlenen) tank devresine geri beslenir ve devrenin Q'suna bağlı olarak osilasyonlar yapar ve NQR absorpsiyonu sonucu Q'daki değişikliklere doğrudan cevap verir. Negatif yarı çevrimde T_4 kapalıdır fakat pozitif yarı çevrimde T_3 'deki akım R_3 tarafından belirlenen bir oranın artmaya devam eder. Böylece T_3 'ün kollektör akımının bir bileşenide algılanan sinyaldir.



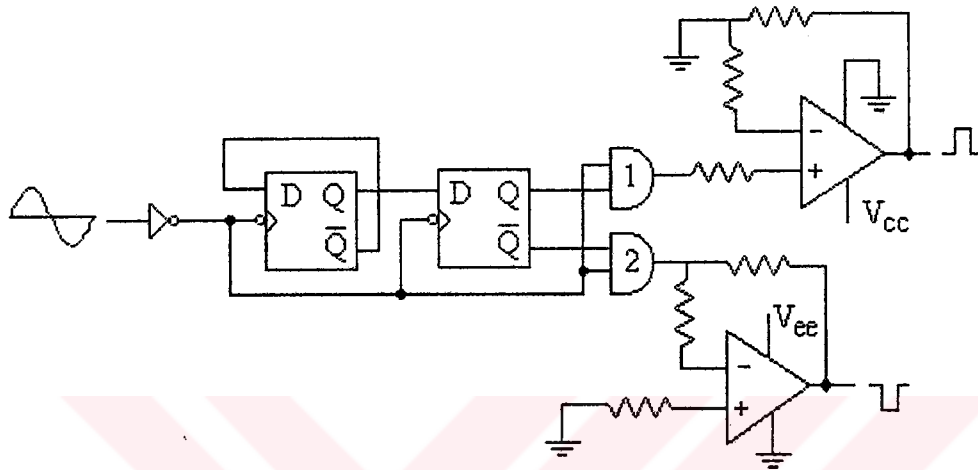
Şekil 4.1 Robinson (1982) tipi osilatör.

4.2 İki Yönlü Simetrik Zeeman Modülatörü

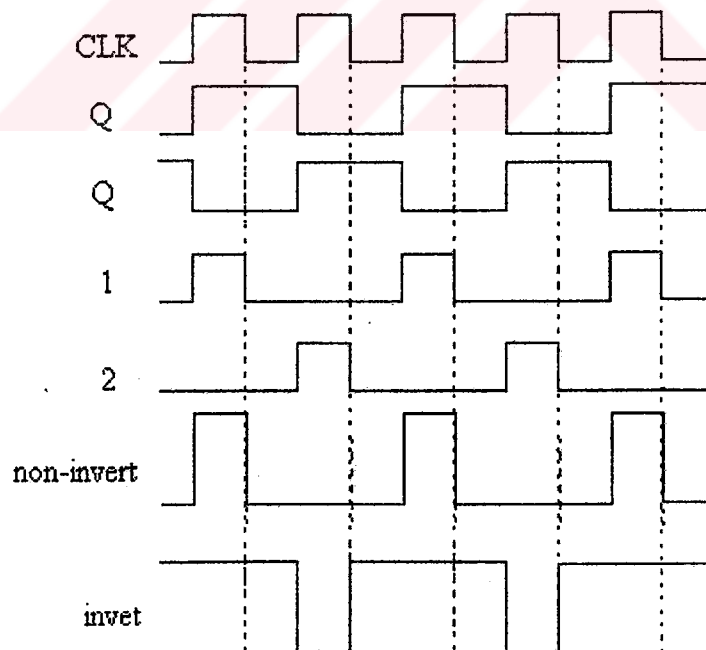
İki yönlü simetrik Zeeman modülasyonunu avantajları Verdieck ve Cornwell (1961) ve Tong (1968) tarafından tartışılmıştır. Kısaca absorpsiyon sinyali sıfır alanda, yani bir döngü içinde iki kere oluşur ve ikinci harmonik faz duyarlı algılama ile kaydedilebilir. Dalga şekli simetrik ve değişen çeyrekler arasında tam olarak sıfır olacağından sinyal boşluk (signal-space) oranının ve dalga şeklinin önemli olmayacaktır ki bu, bunları gerektiren; kare palsa göre bir tercih nedenidir.

Bu çalışmada palsların üretilmesi D Flip Floplar (D FF) kullanılarak yapılan bir lojik devreyle (Şekil 4.2) sağlanmıştır. Schmitt Trigger'e uygulanan sinüsten elde edilen saat frekansı ile D

FF'lerden birbirine göre 180° geçiktirilen palslar clock frekansı ile AND kapısı kullanılarak işlendiğinde birbirlerinden 90° ilerde olan veya aralarında 90° boşluk bulunan iki kare pals elde edilir. Bu palslardan biri bir non-invert yükseltici aracılığı ile negatif gerilime çevrilir ve iki yönlü simetrik kare dalga elde edilmiş olur. Bu süreç içinde üretilen palslar Şekil 4.3'de verilmiştir. Bir mikser yardımı ile birleştirilen bu palslar bir güç yükselticiden geçirilerek Zeeman bobinine sürülür.



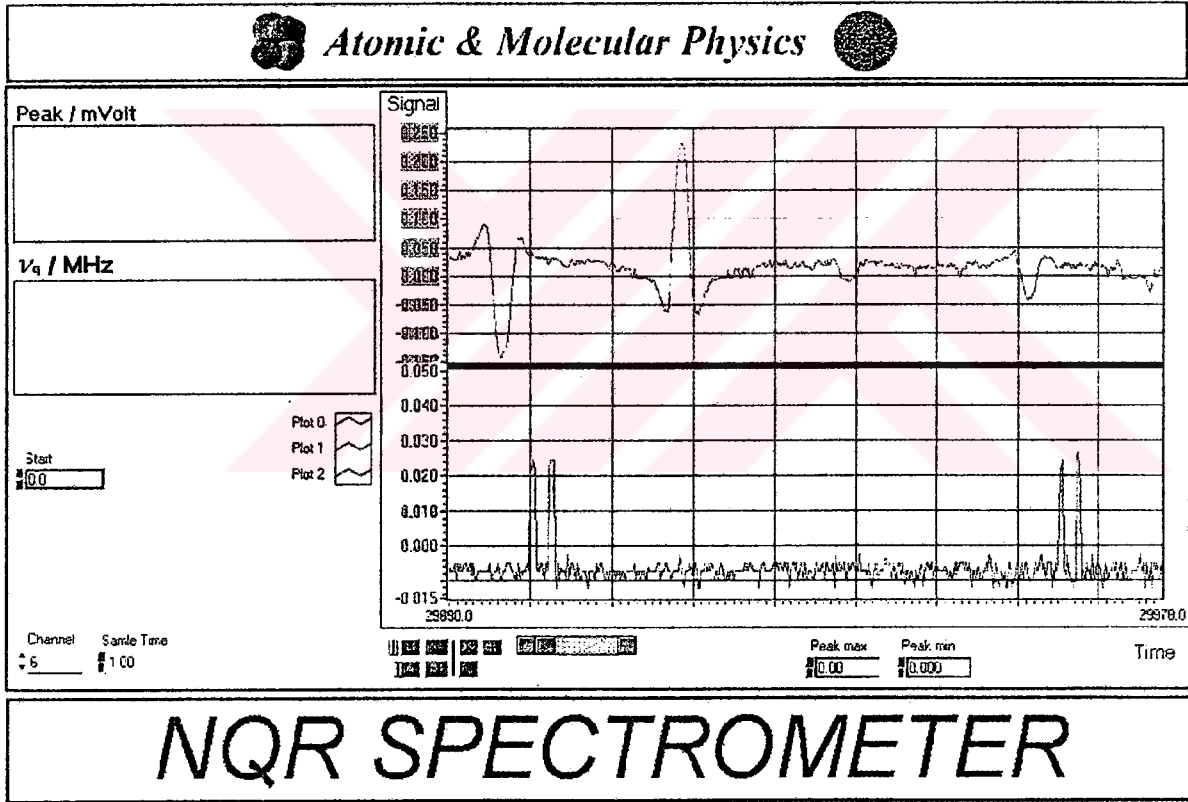
Şekil 4.2 İki simerik yönlü kare dalga devre şeması.



Şekil 4.3 İki simerik yönlü kare dalga devresinin çeşitli noktalardaki dalga şekilleri.

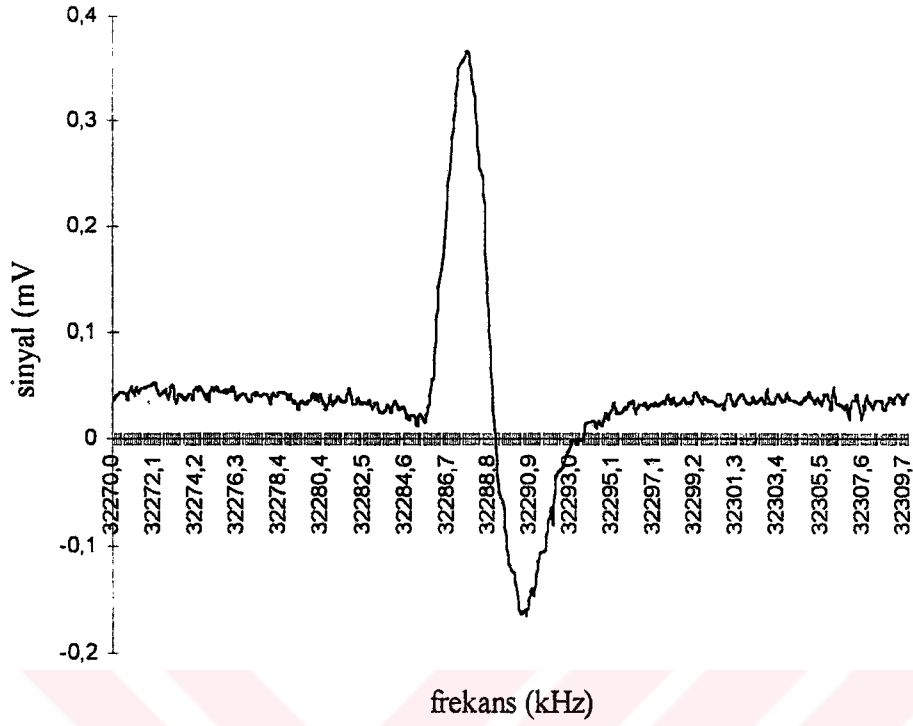
4.3 Bilgisayar Kontrollü Ölçümler

NQR spektromeresinin çıkışı bilgisayara bağlı bir LAB-PC 1200 data alma (data acquisition) kartı ve LABVIEW (Laboratory Virtual Instrument Engineering Workbench) programı ile gerçekleştirilen veri işleme programı (Şekil 4.5) kullanılarak kaydedildi. Çalışmada 1,4-diklorobenzen ile 20°C (Şekil 4.6) ve 33°C da (Şekil 4.7) ölçümler alındı. Elektrik alan gradientinin sıcaklığa bağlı olarak değişmesinden dolayı rezonans frekansları farklı değerlerde gözlenmiştir. 33°C'de ki sinyal gürültü oranındaki düşmenin nedenini saptamak için örnek çıkarılarak bir ölçü alınmıştır (Şekil 4.8). Alınan ölçüye göre bu azalmanın rezonans frekansı ile aynı noktada gözlenen parazitik bir sinyal ve sıcaklık artışına bağlı olduğunu söyleyebiliriz.



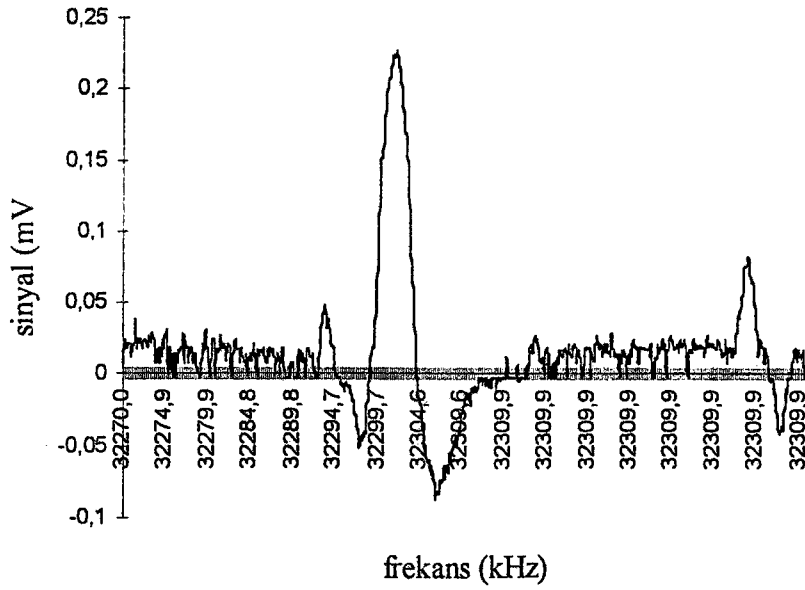
Şekil 4.5 Spektrometre ön görüntüsü.

1,4-diklorobenzen (20 C)



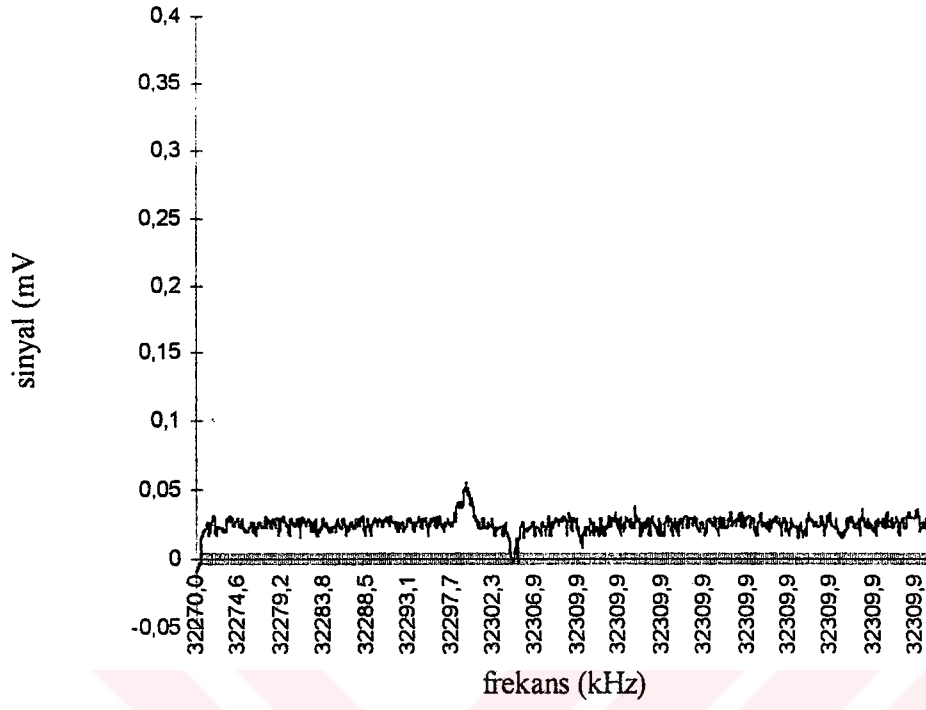
Şekil 4.6 20°C'da alınan 1,4diklorobenzen NQR çizgi şekli.

1,4-diklorobenzen (33 C)



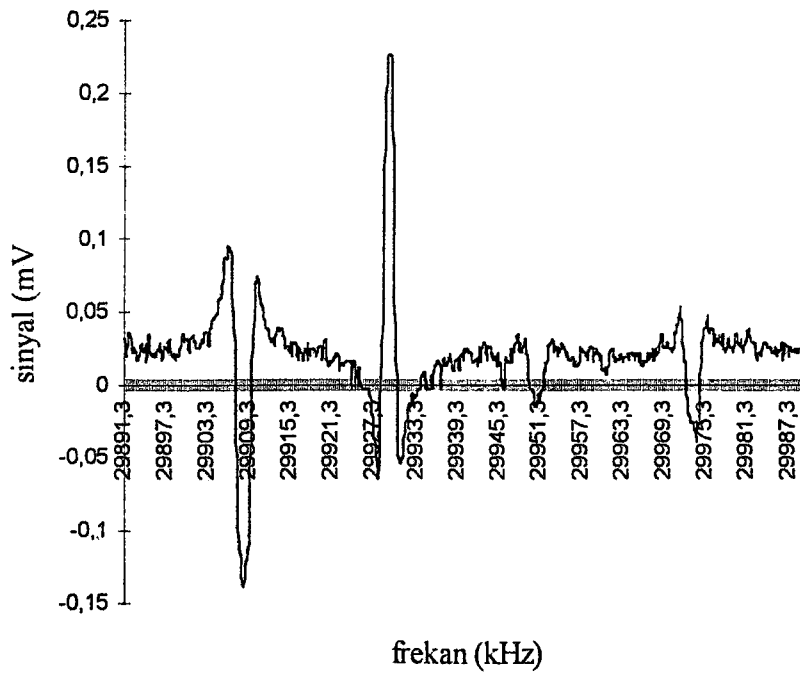
Şekil 4.7 33°C'da alınan 1,4diklorobenzen NQR çizgi şekli.

Boş



Şekil 4.8 33°C'da alınan örneksiz ölçü.

Sodyumklorat



Şekil 4.9 Oda sıcaklığında alınan alınan sodyumklorat NQR çizgi şekli

5. SONUÇLAR ve ÖNERİLER

Bilgisayar aracılığı ile kontrol edilen NQR spektrometresi ile alınan ölçülerin diğer grafik programları ile ölçü sonrası inceleme ve ölçekleme şansı daima varsada en büyük avantajı LABVIEW aracılığı ile ölçü anında dahi ölçeğinin ayarlanması ve çizgi şekillerinin frekans tarama aralığına bağımlı olmaksızın görüntülenebilmesidir. Geline bu aşamanın sonrasında tank devresinin kapasitörünü bir adım motor (stepper motor) yardımıyla kontrol edilmesi ve bunun yanısıra programa yerleştirilebilen bir pik algılayıcısıyla belli bir seviyenin üstündeki piklere ait NQR frekansının ölçü anında belirlenmesi mümkündür. Kullanılan arabirim kartı aynı anda birden fazla girişi ve çıkışı kontrol edebildiğinden osilasyon ve veri kaydı ile birlikte sıcaklık kontrolü yapılaraksıcaklığa bağlı ölçümler alınabilir. Böylece elde edilen piklerin gerçek NQR sinyalleri olup olmadığı tamamiyle bilgisayar aracılığı ile belirlenip çok çeşitli veri paketleri zaman kaybı olmaksızın elde edilebilir.

Ayrıca ölçü sonrasında kayıtlı verilerden çizgi genişliği (line width) ve dolayısı ile malzemanın kristal iç dinamiği hakkında bilgi verebilecek aktivasyon enerjisi gibi fiziksel büyüklüklerin hesaplanmasını sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

DECCA NQR Spectrometer Handbook (1973),İngiltere.

LabView 4.0 Handbook, National Instruments (1997),A.B.D.

Robinson, F.N.H. (1959), "Nuclear Resonance Absorption Circuit", Journal of Scientific Instruments, Vol. 36 481.

Robinson, F.N.H. (1980), "A bi-Symmetric Zeeman Modulator for Nuclear Quadrupole Resonance", Journal of Physics E: Sci. Instrum., Vol. 13.

Robinson, F.N.H. (1982), "A Sensitive Nuclear Resonance Spectrometer for 2-60 MHz", Journal of Physics E: Sci. Instrum., Vol. 15.

Smith, J.A.S. (1971), Chemical Instrumentation, Staton Hall University, So. Orange, N.J. 07079.

Köksal, F. ve Yüksel, H. (1984),Katı Hal Fiziğinden Örneklerle Magnetik Rezonansın İlkeleri, Slichter,C.P.'den çeviri, Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Yayınları, No 137, Ankara.

Tong, D.A. (1968), "A Simple Zeeman Modulator for Nuclear Quadrupole Resonance Spectrometer", Journal of Scientific Instruments, Series 2 Vol. 1.

Verdieck, J.F. ve Cornwell, C.D. (1961), "Radio Frequency Spectrometer with Bidirectional Square Wave Frequency Modulation", The Review of Scientific Instruments, Vol. 32 No. 12.

Wang, T. (1955),Phys. Rev.,99,566.

ÖZGEÇMİŞ

Doğum Tarihi 21.10.1971

Doğum Yeri İstanbul

Lise 1982-1989 Kadıköy Anadolu Lisesi

Lisans 1989-1995 Yıldız Teknik Üniversitesi
Fen-Edebiyat Fak.
Fizik Bölümü

