

---

**SPIS TREŚCI**

|  |    |
|--|----|
| Przedmowa.....   | 7  |
| Rozdział 1. ELEMENTARNY OPIS REZONANSU JĄDROWEGO.....                  | 9  |
| 1.1. Magnetyczne właściwości jąder.....                                | 9  |
| 1.2. Klasyczny opis magnetycznego rezonansu.....                       | 10 |
| 1.2.1 Twierdzenie Larmora.....   | 10 |
| 1.2.2. Wirujący układ współrzędnych. Efektywne pole magnetyczne.....   | 12 |
| 1.2.3. Zjawisko magnetycznego rezonansu.....                           | 14 |
| 1.2.4. Rezonans w próbce makroskopowej.                                |    |
| Namagnesowanie poprzeczne i podłużne.....                              | 16 |
| 1.2.5. Relaksacja spin-sieć i spin-spin. Równania Blocha.....          | 17 |
| 1.2.6. Metoda fali ciągłej.....  | 18 |
| 1.2.7. Spektroskopia impulsowa.....                                    | 23 |
| 1.2.8. Sygnał precesji swobodnej i widmo MRJ.....                      | 24 |
| 1.2.9. Echo spinowe.....   | 27 |
| 1.3. Elementarny kwantowomechaniczny opis magnetycznego rezonansu..... | 30 |
| 1.3.1. Poziomy energetyczne i przejścia rezonansowe.....               | 30 |
| 1.3.2. Relacje Kramersa-Kroniga.....                                   | 33 |
| Rozdział 2. PODSTAWY MATEMATYCZNE KWANTOWEJ TEORII                     |    |
| MAGNETYCZNEGO REZONANSU.....   | 36 |
| 2.1. Funkcje stanu i operatory.....                                    | 36 |
| 2.1.1. Funkcje własne i wartości własne operatorów.....                | 37 |
| 2.1.2. Hermitowskie operatory.....                                     | 37 |
| 2.1.3. „Ket” i „bra” stany.....  | 39 |
| 2.1.4. Macierze operatorów.....  | 39 |
| 2.1.5. Rzutowe operatory.....  | 40 |
| 2.1.6. Macierz iloczynu operatorów.....                                | 41 |
| 2.1.7. Ślad macierzy operatora.....                                    | 41 |
| 2.1.8. Związki komutacyjne.....  | 41 |
| 2.1.9. Operatory unitarne.....   | 43 |
| 2.1.10. Operatory eksponencjalne.....                                  | 45 |
| 2.1.11. Równanie Schrödingera.....                                     | 47 |
| 2.1.12. Równanie Heisenberga.....                                      | 48 |

|   |    |
|---|----|
| 2.2. Macierz gęstości.....  | 48 |
| 2.2.1. Opis stanów za pomocą macierzy gęstości.....                                 | 48 |
| 2.2.2. Równanie Liouville'a.....  | 50 |
| 2.2.3. Koherencja stanów kwantowych.....  | 52 |
| 2.2.4. Macierz gęstości w stanie równowagi.....                                     | 53 |
| 2.3. Przestrzeń Liouville'a.....  | 54 |
| 2.3.1. Superoperatory Liouville'a.....  | 54 |
| 2.3.2. Operatory własne i wartości własne superoperatora.....                       | 56 |
| 2.3.3. Przestrzeń Liouville'a.....  | 56 |
| 2.3.4. Ortogonalny zbiór operatorów w przestrzeni Liouville'a.....                  | 57 |
| 2.3.5. Układ równań dla funkcji $G_n(t)$ .....                                      | 59 |
| 2.3.6. Rozwiązanie układu równań dla funkcji $G_n(t)$ .....                         | 62 |
| Rozdział 3. MOMENT PĘDU I SPIN.....   | 65 |
| 3.1. Moment pędu.....   | 65 |
| 3.1.1. Operator momentu pędu.....   | 65 |
| 3.1.2. Funkcje własne i wartości własne operatorów $J_Z$ i $J^2$ .....              | 66 |
| 3.1.3. Elementy macierzowe operatorów $J_X$ i $J_Y$ .....                           | 68 |
| 3.1.4. Funkcje, operatory w różnych układach odniesienia<br>i moment pędu.....      | 72 |
| 3.2. Spin.....  | 75 |
| 3.2.1. Operatory spinowe.....   | 75 |
| 3.2.2. Spin jądra.....  | 76 |
| 3.2.3. Funkcje własne spinu.....  | 76 |
| 3.2.4. Rotacje w spinowej przestrzeni Hilberta.....                                 | 77 |
| 3.2.5. Elementy macierzowe operatorów obrotu.....                                   | 79 |
| 3.2.6. Dowolny obrót układu odniesienia. Kąty Eulera.....                           | 81 |
| 3.2.7. Ślady operatorów spinowych.....  | 82 |
| Rozdział 4. ODDZIAŁYWANIA MAGNETYCZNE JĄDER I WIDMA<br>MAGNETYCZNEGO REZONANSU..... | 85 |
| 4.1. Przesunięcie chemiczne i sprzężenie spinowo-spinowe.....                       | 85 |
| 4.1.1. Przesunięcie chemiczne.....  | 85 |
| 4.1.2. Sprzężenie spinowo-spinowe.....  | 87 |
| 4.1.3. Widmo MRJ dwóch sprzęgających się jąder.....                                 | 89 |

|   |     |
|---|-----|
| 4.1.4. Silne i słabe sprzężenia spinowe.....  | 101 |
| 4.2. Oddziaływania dipolowe.....  | 107 |
| 4.2.1. Hamiltonian dipolowego oddziaływania. Przybliżenie silnego pola magnetycznego..... | 107 |
| 4.2.2. Widmo układu dwuspinowego. Wzór Pake'a.....  | 115 |
| 4.2.3. Momenty widma MRJ.....   | 123 |
| 4.3. Kwadrupolowe oddziaływania jąder.....  | 137 |
| 4.3.1. Hamiltonian kwadrupolowego oddziaływania.....                                      | 137 |
| 4.3.2. Widmo MRJ kwadrupolowych jąder.....  | 139 |
| Rozdział 5. SYGNAŁ PRECESJI SWOBODNEJ.....  | 144 |
| 5.1. Różne układy odniesienia w MRJ.....  | 144 |
| 5.1.1. Wirujący układ współrzędnych.....  | 144 |
| 5.1.2. Pochylony wirujący układ współrzędnych.....  | 147 |
| 5.1.3. Uśrednienie oddziaływań jąder wskutek rotacji próbki. Spektroskopia MAS.....       | 151 |
| 5.2. Sygnał precesji swobodnej.....   | 155 |
| 5.2.1. Twierdzenie Lowe-Norberga.....   | 155 |
| 5.2.2. Momenty widma MRJ i sygnał precesji swobodnej.....                                 | 160 |
| 5.3. Problem „martwego” czasu w spektroskopii impulsowej MRJ.....                         | 163 |
| 5.4. Metody wieloimpulsowe zwięzania widma MRJ w ciałach stałych.....                     | 167 |
| 5.5. Sygnał precesji swobodnej w układach spinowych z oddziaływaniami dipolowymi.....     | 174 |
| 5.6. Rezonans podwójny. Rozprzęganie spinów.....  | 182 |
| Rozdział 6. ECHO SPINOWE.....   | 186 |
| 6.1. Dwuimpulsowe echo spinowe.....   | 186 |
| 6.1.1. Wzór na sygnał echa spinowego.....   | 186 |
| 6.1.2. Echo Hahna.....  | 190 |
| 6.1.3. Sekwencja impulsów $90^0_X - \tau - 180^0_X - t$ .....                             | 192 |
| 6.2. Echo spinowe w układach z oddziaływaniami kwadrupolowymi.....                        | 194 |
| 6.2.1. Nieselektywne wzbudzenie.....  | 194 |
| 6.2.2. Selekttywne wzbudzenie. Efektywny spin.....  | 196 |
| 6.3. Echo spinowe w układach z oddziaływaniami dipolowymi.....                            | 201 |
| 6.3.1. Wzór na dwuimpulsowy sygnał układu jąder z oddziaływaniami                         |     |

|  |            |
|--|------------|
| dipolowymi.....  | 201        |
| 6.3.2. Zastosowanie superoperatora Liouville'a dla obliczania sygnału dwuimpulsowego echa..... | 203        |
| 6.3.3. Echo spinowe w homojądrowych spinowych układach. Dwuspinowy układ.....                  | 207        |
| 6.3.4. Solid echo w wielospinowych homojądrowych układach.....                                 | 212        |
| 6.3.5. Echo spinowe w heterojądrowych układach. Dwuspinowy układ.....                          | 216        |
| 6.3.6. Echo spinowe w wielospinowych heterojądrowych układach.....                             | 219        |
| <b>Rozdział 7. DWUWYMIAROWA SPEKTROSKOPIA MRJ.....</b>   | <b>225</b> |
| 7.1. Zasady metody dwuwymiarowej spektroskopii MRJ.....  | 225        |
| 7.2. Rozdzielenie niejednorodnego i jednorodnego wkładów w szerokość linii MRJ.....            | 227        |
| 7.3. <i>J</i> - spektroskopia MRJ.....   | 232        |
| 7.3.1. <i>J</i> - spektroskopia homojądrowych układów.....                                     | 233        |
| 7.3.2. <i>J</i> - spektroskopia heterojądrowych układów.....                                   | 237        |
| 7.4. Spektroskopia COSY.....   | 239        |
| 7.4.1. Zwiększenie natężenia sygnałów MRJ jąder o małym naturalnym rozpowszechnieniu.....      | 239        |
| 7.4.2. Korelacja przesunięć chemicznych.....   | 245        |
| <b>Rozdział 8. WIELOKWANTOWA SPEKTROSKOPIA MAGNETYCZNEGO REZONANSU JĄDROWEGO.....</b>          | <b>250</b> |
| 8.1. Wielokwantowa koherencja stanów.....  | 250        |
| 8.2. Formowanie wielokwantowej koherencji.....   | 252        |
| 8.2.1. Dwuimpulsowa sekwencja $90_X^0 - \tau_p - 90_X^0$ .....                                 | 252        |
| 8.2.2. Sekwencja Jeenera – Broekaerta.....   | 255        |
| 8.3. Ewolucja wielokwantowej koherencji.....   | 258        |
| 8.3.1. Swobodna ewolucja wielokwantowej koherencji.....  | 258        |
| 8.3.2. Separacja wielokwantowych koherencji różnego rzędu.....                                 | 260        |
| 8.4. Rejestracja wielokwantowej koherencji.....  | 262        |
| 8.5. Wielokwantowe widma MRJ.....  | 264        |
| Dodatek.....   | 266        |
| Literatura.....  | 271        |