

Wybrane zagadnienia fizyki rezonansu magnetycznego

(2 rok; studia III stopnia, semestr zimowy)

Wykład – dwie godziny tygodniowo

Prowadzący – prof. zw., dr hab. Mykola Serheiev

Wykład 1. Podstawy matematyczne kwantowej teorii magnetycznego rezonansu. Funkcje stanu i operatory. Funkcje własne i wartości własne operatorów. Hermitowskie operatory. „Ket” i „bra” stany. Macierze operatorów. Rzutowe operatory. Macierz iloczynu operatorów. Ślad macierzy operatora. Związki komunikacyjne. Operatory unitarne. Operatory eksponencjalne.

Wykład 2. Równanie Schrödingera. Równanie Heisenberga. Macierz gęstości. Równanie Liouville’a. Koherencja stanów kwantowych. Macierz gęstości w stanie równowagi.

Wykład 3. Przestrzeń Liouville’a. Superoperatory Liouville’a. Operatory własne i wartości własne superoperatora. Ortogonalny zbiór operatorów w przestrzeni Liouville’a. Układ równań dla funkcji $G_n(t)$. Rozwiązanie układu równań dla funkcji $G_n(t)$.

Wykład 4. Moment pędu i spin. Operator momentu pędu. Funkcje własne i wartości operatorów \hat{J}_z i \hat{J}^2 . Elementy macierzowe operatorów \hat{J}_x i \hat{J}_y . Funkcje, operatory w różnych układach odniesienia i moment pędu.

Wykład 5. Spin. Operatory spinowe. Spin jądra. Funkcje własne spinu. Rotacje w spinowej przestrzeni Hilberta. Elementy macierzowe operatorów obrotu. Dowolny obrót układu odniesienia. Kąty Eulera. Ślady operatorów spinowych.

Wykład 6. Nieprzywiedlne (nieredukowalne) operatory tensorowe w NMR. Niektóre właściwości operatorów tensorowych. Hamiltoniany oddziaływania w NMR a nieprzywiedlne operatory tensorowe. Zapis operatora kwadrupolowego oddziaływania w NMR przez nieprzywiedlne operatory tensorowe.

Wykład 7. Hamiltonian kwadrupolowego oddziaływania a teoria zaburzeń. Widmo NMR kwadrupolowego jądra. Przejście centralne $\pm 1/2 \leftrightarrow \mp 1/2$.

Wykład 8. MAS spektroskopia. Rozwinięcie Dysona. Spektrum NMR rotującej pary spinów z $I = 1/2$. Twierdzenie o inwariantności (niezmienniczości) drugiego momentu widma NMR.

Wykład 9. Okresowe Hamiltoniany i okresowe sekwencje impulsów radiowych. Rozwinięcie Magnusa i teoria średniego Hamiltonianu. Sekwencja Carra-Purcella. Uśrednienie oddziaływań jąder wskutek rotacji próbki.

Wykład 10. Metody wieloimpulsowe zwięzania widm MRJ w ciałach stałych. Rezonans podwójny. Rozsprzęganie spinów.

Wykład 11. Sygnał precesji swobodnej w układach spinowych z oddziaływaniami dipolowymi.

Wykład 12. Impulsowe zaburzenie układu spinowego. Widmo częstotliwości prostokątnego impulsu. Nieselektywne wzbudzenie. Selekttywne wzbudzenie. Wzbudzenie szerokich sygnałów. Dwuwymiarowa spektroskopia NMR. Nutacyjna spektroskopia NMR kwadrupolowych jąder.

Wykład 13. Echa spinowe kwadrupolowych jąder. Echa spinowe Solomona. Nieselektywne wzbudzenie. Echa spinowe Solomona przy selektywnym wzbudzeniu.

Wykład 14. Echa spiniwe kwadrupolowych jąder (przedłużenie). Nieselektywne wzbudzenie. Selekttywne wzbudzenie. Efektywny spin. Rozdzielenie niejednorodnego i jednorodnego wkładu w szerokość linii MRJ.

Wykład 15. Wielokwantowa spektroskopia. Wielokwantowa koherencja. Formowanie wielokwantowej koherencji. Sekwencja Jeenera – Broekaerta. Ewolucja wielokwantowej koherencji. Separacja wielokwantowych koherencji różnego rzędu. Rejestracja wielokwantowych koherencji. Wielokwantowe widma MRJ.

Literatura

1. M.Serheiev, Wybrane zagadnienia fizyki rezonansu magnetycznego, Szczecin,Usz, 2014-2015
<http://sergeev.fiz.univ.szczecin.pl/Dydaktyka/Wyklady/Wybrane%20zagadnienia%20fizyki%20rezonansu%20magnetycznego/spis.html>
2. M.Serheiev (N.A.Sergeev), Wstęp do kwantowej teorii magnetycznego rezonansu jądrowego, WSP, Słupsk, 1996
<http://sergeev.fiz.univ.szczecin.pl/Dydaktyka/Skrypty/Wstep%20do%20kwantowej%20teorii%20magnetycznego%20rezonansu%20jadrowego/spis.html>
3. D. Freude, J. Haase, in: NMR Basic Principles and Progress, Springer, Berlin, Heidelberg, vol. 29, pp. 3-90 (1993, updated version: August 2014: <http://www.quad-nmr.de>).