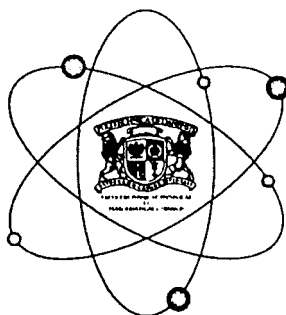


Katedra Fizyki Molekularnej
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej
POLITECHNIKA GDAŃSKA

XI OGÓLNOPOLSKA KONFERENCJA
„KRYSTAŁY MOLEKULARNE '98”

9-12 września 1998
Gdańsk - Jelitkowo

Program i streszczenia



Gdańsk 1998

Ruch cieplny jąder a kształt widma NMR ciał stałych

Mikołaj Siergiejew

Katedra Fizyki, Uniwersytet Szczeciński, ul. Wielkopolska 15, 70-451 Szczecin.
e-mail: sergeev@uoo.univ.szczecin.pl

Problem obliczenia kształtu widma absorpcji NMR $g(\Delta)$ ciał stałych (albo sygnału $G(t)$ zaniku indukcji swobodnej FID), w przypadku gdy oddziaływania między jądrami są modulowane przypadkowymi cieplnymi ruchami jąder, pozostaje wciąż nierozstrzygniętym. W pracach [1,2] do obliczenia sygnału FID zaproponowano metodę, która jest podobna do metody momentów Van-Vlecka [3]. Metoda ta polega na przybliżeniu sygnału FID $G(t)$ za pomocą szeregu Taylora

$$G(t) = \sum_{n=0,1,\dots,\infty} [(it)^n / n!] a_n \quad (1)$$

i następnym obliczeniu współczynników a_n („momentów”). Początkowe współczynniki a_n ($n=0,1,2,3,4$), podobnie jak początkowe momenty Van-Vlecka, można łatwo obliczyć ściśle dla dowolnych modeli przypadkowego ruchu jąder w ciele stałym [1,2]. Jednak praktyczne zastosowanie szeregu (1) wymaga obliczenia następnych współczynników a_n , co nie jest na razie możliwe wskutek olbrzymiego wzrostu trudności, które powstają nawet przy obliczeniu a_5 . Inne podejście do rozwiązania problemu obliczenia kształtu widma NMR ciał stałych zaproponowano w pracach [4,5]. Korzystając ze stochastycznego równania Liouville'a - Smoluchowskiego oraz z metody Moriego [6] otrzymano następujący uogólniony wzór na kształt $g(\Delta)$ widma NMR

$$g(\Delta) = \text{Re} \{ 1 / \{ i\Delta + v_0^2 / [i(\Delta - \omega_1) + v_1^2 / [i(\Delta - \omega_2) + v_2^2 / [\dots]]]] \} \} \cdot \quad (2)$$

Tu $\Delta = \omega - \omega_0$; ω_0 - częstość Larmora;

$$v_0^2 = a_2, \quad v_1^2 = (a_2 a_4 - a_3^2 - a_2^3) / a_2^2, \quad \dots, \\ \omega_1 = a_3 / a_2, \quad \omega_2 = (a_3^3 + a_5 a_2^2 - 2 a_2 a_3 a_4) / (a_4 a_2^2 - a_2 a_3^2 - a_2^4), \quad \dots$$

W niniejszym komunikacie omówiono zastosowanie wzoru (2) do obliczenia kształtu widma NMR ciał stałych w przypadku różnych układów spinowych (układy spinów z oddziaływaniami dipolowymi oraz kwadrupolowymi) i różnych modeli cieplnego ruchu jąder w ciałach stałych.

Literatura

1. I.J. Lowe, K.W. Vollmers and M. Punkkinen, *Proc. of I Specialized Colloque AMPERE, Kraków*, (1973) 70.
2. H.A. Sergeev, D.C. Ryabushkin, *Известия ВУЗов, Физика*, 7 (1982) 48.
3. J.H. Van-Vleck, *Phys. Rev.*, 74 (1948) 1148.
4. N.A. Sergeev and D.S. Ryabushkin, *Abstracts of IX School AMPERE. Novosibirsk-Shushenskoje-Krasnojarsk*, (1987) 291.
5. H.A. Sergeev, D.C. Ryabushkin, A.B. Sapiga, C.H. Maksimova, *Известия ВУЗов, Физика.*, 11 (1989) 15.
6. M. Siergiejew, *Wstęp do kwantowej teorii magnetycznego rezonansu jądrowego*, Wydawnictwo WSP, Słupsk, 1996.