

СПИНОВАЯ ДИНАМИКА

Программа курса лекций

I. Магнитный резонанс: основные понятия (кратко)

1. Феноменологическое описание магнитного резонанса

Эффект Зеемана и спиновый магнетизм. Прецессия магнитного момента. Явление магнитного резонанса. Вращающаяся система отсчета и векторная модель.

2. Уравнения Блоха

T_1 и T_2 релаксация, уравнения Блоха. Индуктивная регистрация сигнала. Импульсы в магнитном резонансе, спад свободной индукции. Фурье-спектроскопия. Простейшие импульсные последовательности.

3. Спиновый гамильтониан

Гипотеза спинового гамильтониана. Спиновые взаимодействия в ЯМР. Спиновые взаимодействия в ЭПР.

II. Формализм матрицы плотности в магнитном резонансе

1. Основы квантово-статистического описания

Описание ансамблей спинов: от волновой функции к матрице плотности. Свойства матрицы плотности. Чистые и смешанные состояния, примеры. Эволюция матрицы плотности: уравнение Лиувилля-фон Неймана. Решение уравнения Лиувилля-фон Неймана и расчет оператора эволюции. Прецессия спиновой намагниченности и явление магнитного резонанса на языке матрицы плотности.

2. Базовые эксперименты в магнитном резонансе (в рамках формализма матрицы плотности)

Одноимпульсный эксперимент в магнитном резонансе. Квадратурное детектирование сигнала. Фаза сигнала и фазовые циклы. Спиновое эхо. Спин-локинг.

3. Операторный формализм в магнитном резонансе

Матрица плотности системы спинов $\frac{1}{2}$. Операторный формализм. Населенности состояний и когерентности, порядок когерентности. Путь переноса когерентности. Эволюция различных операторов: свободная прецессия и спин-спиновое взаимодействие. Последовательности INEPT и INADEQUATE.

III. Магнитный резонанс в двух и трех измерениях

Основные принципы. Двумерное преобразование Фурье и вид двумерных спектров. Примеры последовательностей ЯМР в двух измерениях: COSY, TOCSY, HSQC/HMQC. Магнитный резонанс в трех измерениях: общие принципы и примеры.

IV. Спиновая релаксация

1. Общая теория релаксации

Флуктуации и релаксация, механизмы релаксации. Теория Рэдфилда. T_1 - и T_2 - релаксация в двухуровневой системе под действием локальных полей.

2. Дипольная релаксация

Дипольная релаксация. Кросс-релаксация: эффект Оверхаузера и ядерный эффект Оверхаузера (NOE). Кросс-коррелированная релаксация. Двумерные ЯМР эксперименты: NOESY/EXSY/ROESY, TROSY.

V. Элементы ЯМР в твердом теле

1. Зависимость спиновых взаимодействий от ориентации молекул

Тензора магнитных взаимодействий. Запись тензоров в системе главных осей и в лабораторной системе отсчета. Эйлеровы вращения системы координат, составные вращения. Неприводимые тензора (кратко). Вращение образца под магическим углом: усреднение анизотропных взаимодействий.

2. Импульсные методы

Кросс-поляризация. Усреднение взаимодействий при помощи импульсов (гомоядерный и гетероядерный декаплинг). Рефокусировка взаимодействий (рекаплинг).

VI. Спиновая динамика под действием зависящего от времени гамильтониана

1. Теория среднего гамильтониана

Оператор эволюции для зависящего от времени спин-гамильтониана. Вычисление среднего гамильтониана. Средний гамильтониан для случая гамильтониана, периодически меняющегося во времени. Средний гамильтониан в представлении взаимодействия. Примеры: сравнение импульсных последовательностей CP и CPMG, твердотельное эхо. Композитные импульсы.

2. Теория Флоке

Формулировка задачи и ее общее решение для периодически изменяющегося во времени гамильтониана. Представления Фурье и Флоке для гамильтониана и матрицы плотности. Диагонализация гамильтониана Флоке. Одноквантовый резонанс, сдвиг Блоха-Зигерта. Многоквантовые резонансы. Сателлиты в ЯМР с вращением образца под магическим углом.