

Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
Facultatea de Fizică, Departamentul de Fizica Biomedicala, Teoretica și Spectroscopie Moleculară
Anul universitar
Semestrul II

SYLLABUS

1. Informații generale despre curs, seminar, lucrare practică sau laborator

Disciplina:	Simularea spectrelor
Cod:	FME3204
Anul de studii:	Anul I, semestrul II
Forma de învățământ:	Masterat cu frecvență, FC
Tipul cursului:	obligatoriu
Nr. credite:	5
Nr. ore săptămânal:	2 curs + 1 laborator

2. Informații despre titularul de curs, seminar, lucrare practică sau laborator

Nume, titlu științific: Lect. dr. Craciun Stefania-Cora
Informații de contact: cora.craciun@phys.ubbcluj.ro

3. Descrierea disciplinei:

Obiectivele cursului. Cursul prezintă noțiuni legate de simularea spectrelor de rezonanță magnetică. Cursul se axează pe modelarea interacțiunii sistemelor de spini cu radiația electromagnetică utilizând metode de calcul numeric.

Competențele dobândite prin absolvirea disciplinei de către studenți sunt: capacitatea de a modela numeric spectrele de rezonanță magnetică; însușirea unor metode numerice de simulare a spectrelor prezentate în literatură.

4. Bibliografia obligatorie:

1. C. Crăciun, Modelarea spectrelor de Rezonanță Electronică de Spin în unda continuă, Ed. Napoca Star, 2009
2. J. A. Weil, J. R. Bolton, J. E. Wertz, Electron Paramagnetic Resonance Theory and Practical Applications, Wiley, 1994.
3. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Quantum Mechanics, Wiley-VCH, 1997.
4. B. H. Bransden, C. J. Joachain, Quantum mechanics, Pearson Education, 2000.
5. <http://www.easyspin.org/>
6. S. Stoll, Spectral simulations in solid-state electron paramagnetic resonance, PhD thesis, ETH Zürich, 2003.
7. http://structbio.vanderbilt.edu/chazin/classnotes/fall_2006_bchm343/Product_Operator_Sorensen.pdf
8. http://www-keeler.ch.cam.ac.uk/lectures/understanding/chapter_6.pdf

5. Materiale folosite în cadrul procesului educațional specific disciplinei:

Laboratoarele vor utiliza rețeaua de calculatoare a Facultății de Fizică.

6. Tematica cursurilor si a laboratoarelor

Cursuri:

- Metode numerice utilizate in simularea spectrelor : Transformata Fourier, convolutie, interpolare
- Metode numerice utilizate in simularea spectrelor : rezolvarea ecuatiilor, metode de valori si vectori proprii
- Descrierea teoretica a spectrelor de rezonanta magnetica: clasic, cuantic
- Hamiltonianul de spin. Forma matriceala
- Spectre de rezonanta magnetica: stari energetice, campuri magnetice de rezonanta
- Spectre de rezonanta magnetica: intensitatea si forma semnalelor de rezonanta
- Simularea spectrelor pulberilor policristaline: intensitatea spectrala, metode numerice
- Simularea spectrelor pulberilor policristaline: metoda proiectiilor
- Operatori produs. Matricea densitate
- Simularea spectrelor in impulsuri

Laboratoare:

- Metode de interpolare a datelor numerice
- Metode numerice de rezolvare a ecuatiilor. Operatii cu matrici hermitice
- Descrierea cuantica a spectrelor de rezonanta magnetica: probabilitati de tranzitie
- Forma matriceala a Hamiltonianului de spin
- Calculul nivelelor energetice ale sistemelor de spin si a campurilor magnetice de rezonanta
- Convolutia spectrelor de linii cu functii de forma data
- Simularea spectrelor pulberilor policristaline obtinute in unda continua
- Metoda proiectiilor
- Operatori produs
- Simularea spectrelor in impulsuri

7. Modul de evaluare:

- Activitatea de laborator si efectuarea temelor: 30%
- Proiect: 30%
- Examen scris la sfârșitul semestrului: 40%.