

Universitatea " Babeş-Bolyai" Cluj-Napoca  
Facultatea de Fizică, Scoala doctorala de Fizica  
Anul universitar 2009-2010  
Semestrul: II

## SYLLABUS

### I. Informații generale despre curs, seminar și lucrări de laborator

Disciplina: Metode avansate în fizica atomică și nucleară

Anul de studii: I (sem. 2)

Codul: FSD0009

Nr. de credite: 20

Nr. ore / săptămână: 2 curs + 1 seminar

Locul de desfășurare: conform indicației din Orar

Programarea în orar: conform orarului care se va întocmi

### II. Informații despre titularii cursului

Nume: Leontin David, Viorica Simon

Grad didactic: profesor

Titlu științific: doctor

E-mail: [leodavid@phys.ubbcluj.ro](mailto:leodavid@phys.ubbcluj.ro), [viosimon@phys.ubbcluj.ro](mailto:viosimon@phys.ubbcluj.ro),

Telefon: 405300, int. 5185, 5173

Ore de audiență: 2 ore / săptămână

### III. Obiectivele disciplinei și competențe

**Obiective:** Dobândirea de cunoștințe referitoare la aplicațiile actuale ale metodelor avansate de investigare în fizica atomică și nucleară. Însusirea unor noțiuni legate de rezonanța magnetică precum și spectroscopia fotoelectronică de raze X, determinarea condițiilor de rezonanță în prezența diferitelor tipuri de interacțiuni, aplicarea expresiei generale a Hamiltonianului de spin pentru determinarea nivelelor energetice, etc. Aplicarea acestor metode în investigarea atomilor și moleculelor de interes biomedical.

**Competențe:** Doctoranzii vor dobândi cunoștințe utile pentru aplicarea metodelor avansate de investigare în fizica atomică și nucleară, care pot fi aplicate în laboratoarele UBB, pentru cercetările angajate în tezele lor de doctorat.

### IV. Bibliografie:

[1] L. David, C. Crăciun, O. Cozar, V. Chiș, Rezonanță Electronică de Spin. Principii, metode, aplicații, Presa Univ. Clujeană, Cluj-Napoca, 2001.

[2] L. David, O. Cozar, Rezonanță Electronică de spin pe sisteme paramagnetice cuplate, Presa Univ. Clujeana, Cluj-Napoca, 1999.

[3] L. David, C. Crăciun, V. Chiș, O. Cozar, Rezonanță Electronică de Spin. Probleme, Casa Cărții de Știință, 2000

[4] C. P. Poole, Jr. Farach, H. A. Farach, Handbook of Electron Spin Resonance, American Institute of Physics Press, NY, 1994.

- [5] A Bleaney, Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions, Dover NY 1986.
- [6] F. E. Mabbs, D. Collison, Electron Paramagnetic Resonance of d Transition Metal Compounds, Elsevier, Amsterdam, 1992
- [7] J.A. Weil, J.R. Bolton, J.E. Wertz, Electron Paramagnetic Resonance Theory and Practical Applications, Wiley, New York, 1994.
- [8] F. Gerson, Electron Spin Resonance Spectroscopy for organic Radicals, Wiley VCH, 2008
- [9] J. Keeler, Understanding NMR Spectroscopy, Wiley, 2002.
- [11] Becker, Edwin, High Resolution NMR, Academic Press, 2000.
- [12] H. Friebolin, Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, 3rd Ed. Wiley-VCH, 1998
- [13] B. Miller, Advanced Organic Chemistry, Prentice Hall. 1995
- [14] B. Ross, E. Danielsen, Magnetic resonance spectroscopy diagnosis of neurological diseases, Marcel Dekker; 1998.
- [15] R. De Graaf, In vivo NMR spectroscopy: Principles and techniques, John Wiley & Sons; 1999.
- [16] C. Boesch, Molecular aspects of magnetic resonance imaging and spectroscopy, Mol Aspects Med, 1999.
- [17] E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Craddock, Structural Methods in Inorganic Chemistry, 2<sup>nd</sup> ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, 1991.
- [18] J. T. Grant, D. Briggs, Surface Analysis by Auger and X-ray Photoelectron Spectroscopy, published by IM Publications, Chichester, UK, 2003
- [19] J.F. Moulder, W.F. Stickle, P.E. Sobol, K.D. Bomben, Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy, Perkin-Elmer Corp., Eden Prairie, MN, USA, 1992.
- [20] <http://www.sciencedirect.com/science/journal/00396028>
- [21] <http://www.elsevier.com/wps/find/journaldescription.cwshome/505676/description#description>

#### V. Materiale folosite în cadrul procesului educațional specific disciplinei:

- a). **la curs:** calculator pentru prelegerea combinată (Power Point, folii, tablă).
- b). **la seminar:** interpretarea datelor experimentale și efectuarea unor calcule pe diferite cazuri reprezentative.

#### VI. Planificarea / Calendarul întâlnirilor și al verificărilor / examinărilor / intermediare.

##### a). CURS

Nr. temă	Tematica	Nr. ore	Bibliografie
1	Hamiltonianul de spin. Clusteri homonucleari. Clusteri binucleari. Clusteri trinucleari. Clusteri tetranucleari. Clusteri heteronucleari. Schimb slab în compuși polinucleari. Interacțiunea directă. Superschimbul. Parametrii Hamiltonianului de spin. Tensorul <b>g</b> . Tensorul <b>D</b> . Parametrul $J_{ij}$ . Spectre pulbere simulate pentru paramagneți cu $S > 5/2$ . Frustrare de spin.	2	[1-3]
2	Spectrometrul RES milimetric: Sistemul de producere a	2	[2,3]

	câmpului magnetic principal. Sursa de unde milimetrice (Transmisia undelor milimetrice. Cavitatarea RES. Cavitatarea probei și controlul temperaturii. Detectorul milimetric). Aplicații ale RES în câmp intens (Probe solide: soluții înghețate și pulberi policristaline. Soluții lichide magnetic diluate. Dinamică moleculară) Perspective de dezvoltare a spectrometrele RES în câmp intens.		
<b>3</b>	Tipuri de dublă rezonanță. Efectul Overhauser. Tripla rezonanță. Hamiltonianul de spin și nivele energetice. nivelele energetice de ordinul I în cazul cuplajului hiperfin izotrop nivelele energetice de ordinul I în cazul cuplajului hiperfin anizotrop. Descrierea unui experiment ENDOR. Noțiuni generale. Dependența unghiulară a frecvențelor ENDOR. ENDOR în solide. ENDOR	<b>2</b>	[3-5]
<b>4</b>	Fenomene de ecou în RES. Ecoul Hahn. Ecoul în două pulsuri cu unghi de rotire mare. Ecoul stimulat. Ecourile gradient. Fenomenul de ecou în sisteme multi-spin. Ecouri prin transfer de coerenta electronica. Ecouri prin transfer de coerenta nucleara. Ciclaaj de fază în RES în impulsuri. Creerea și detecția coerenței și a polarizării în RES în impulsuri. Experimente de transfer de polarizare. Tranziții RES permise. Experimente de transfer de coerență.	<b>2</b>	[4,5]
<b>5</b>	Principii, instrumente, procese de relaxare, transfer selectiv de polarizare, secvente bidimensionale de baza, corelarea deplasării heteronucleare. Experimentul spin-ecou, RMN multipuls. Experimente de corelare homonucleare (COSY, etc) și heteronucleare (HETCOR, HMQC, etc.)	<b>2</b>	[1-3] [6-9]
<b>6</b>	Aplicații DEPT, $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ COSY, HMBC, HMQC, HOHAHA (TOCSY). Experimentele NOE (NOESY, HOESY, ROESY, etc). Aplicațiile RMN în științele medicale	<b>2</b>	[10,11]
<b>7</b>	Modularea ecoului în două pulsuri. Ciclaaj de fază ESEEM. Modularea ecoului în trei pulsuri. Tehnica ESEEM 2D. TF-2D a experimentului. Principii de bază. Ciclaaj de faza în experimentele HYSORE. Aspecte de calcul în simularea experimentelor HYSORE. Tehnici experimentale (INADEQUATE, EXSY, etc)	<b>2</b>	[11-15]
<b>8</b>	Diagnostic diferential ( $^1\text{H}$ -MRS) a tumorilor pe creier, Planning chirurgical, monitorizarea tratamentului cu ajutorul tehnicii $^1\text{H}$ -MRS. Studiul funcționării organismului	<b>2</b>	[14], [16-17]
<b>9</b>	Spectroscopia fotoelectronica de raze X (SFX). Principiul metodei	<b>4</b>	[18-20]
<b>10</b>	Aplicații ale SFX în studii la nivel atomic	<b>4</b>	[19-20]
<b>11</b>	Corelarea rezultatelor SFX cu date RMN și RES	<b>2</b>	[18-21]

12	Corelarea rezultatelor SFX cu date IR	2	[20,21]
----	---------------------------------------	---	---------

#### b). SEMINARIU

Nr. temă	Tematica	Nr. ore	Bibliografie
1	Corelarea informațiilor obținute din RES cu cele din alte metode spectroscopice și magnetice. Informații complementare obținute prin rezonanță multiplă. Obținerea spectrelor RMN și RES în impulsuri din FID, folosind transformata Fourier	1	[1-4]
2	Determinarea valorilor proprii ale tensorilor <b>g</b> și <b>D</b> din studii pe monocristal prin RES în câmp intens.	1	[3-5]
3	Modularea ecoului în două pulsuri. Determinarea valorilor proprii ale tensorului <b>A</b> din studii pe monocristal prin ESEEM și HYSORE.	1	[12-14]
4	Determinarea constantelor de cuplaj hiperfine din spectrele ESEEM. HYSORE. ENDOR. Interpretarea spectrelor RMN bidimensionale ale moleculelor biologice.	1	[13-18]
5	Interpretarea spectrelor SFX. Analiza calitativa.	1	[18,19]
6	Caracterizarea morfologica a unor biomateriale cu ajutorul SFX	1	[19]
7	Tehnici combinate pentru analiza suprafetelor	1	[20,21]

#### VII. Mod de evaluare

- 20% evaluare pe parcurs (teste grila)
- 20% activitate seminar
- 20% intocmirea unor referate pe o tematica data
- 40% examen de sfarsit de semestru

**Data,**  
3 martie 2009

Semnatura titularilor,