

**Конверсия спиновой намагниченности в долгоживущие спиновые состояния в многоспиновых системах. Теоретический анализ спиновой динамики**

Родин Б. А.

Новосибирский государственный университет  
Международный томографический центр, г. Новосибирск

Долгоживущие спиновые состояния – важная и относительно новая концепция в ядерном магнитном резонансе. Такие состояния находят применение в спиновой гиперполяризации, при изучении диффузии методами ЯМР, при исследовании медленных молекулярных движений и т. д. В настоящее время хорошо известны долгоживущие синглетные состояния в системах, где основным механизмом релаксации является дипольная релаксация, не способная вызывать синглет-триплетные переходы. Одним из методов генерации таких состояний может быть адиабатическое переключение радиочастотного поля.

Потенциально долгоживущие состояния не ограничиваются синглетным состоянием пары спинов. В связи с этим интерес представляют, например, синглет-синглетные состояния двух пар спинов, а также сравнительный анализ возможных долгоживущих состояний: их времена релаксации, зависимость данных времен жизни от молекулярного окружения.

В данной работе были предложены методы получения синглетных спиновых состояний для 4-спиновой системы типа  $AA'XX'$ . Были построены корреляционные диаграммы, а также определены условия отстройки радиочастотного поля от центра спектра, при котором состояние населенность  $T_+T_+$  переходит в синглет-синглетное состояние под действием адиабатического переключения амплитуды радиочастотного поля. Также была определена максимальная возможная поляризация после последовательности включения-выключения радиочастотного поля для системы  $AA'XX'$ . Было проведено численное моделирование эффективности конверсии спиновой намагниченности в населенность синглет-синглетного состояния при линейной развертке поля при варьировании отстройки частоты поля от центра спектра, амплитуды поля и времени переключения. Также было предложено использовать так называемый метод GRAPE для вычисления оптимального профиля переключения (изменение поля  $B_1$  медленно вблизи антипересечений спиновых уровней). Были предприняты попытки анализа пятиспиновых систем.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук. К.Л. Иванов, канд.хим.наук. А.С. Кирютин