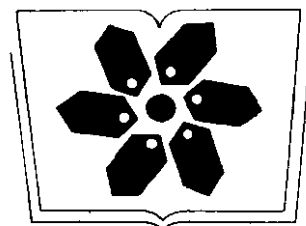


一维和二维核磁共振原理

〔瑞士〕R.R.恩斯特
〔荷〕G.博登豪森 著
〔德〕A.沃考恩

科学出版社



中国科学院科学出版基金资助出版

一维和二维核磁共振原理

〔瑞士〕R. R. 恩斯特 〔荷〕G. 博登豪森

〔德〕A. 沃考恩 著

毛希安 译

杜有如 沈联芳 叶朝辉 校

科学出版社

1997

内 容 简 介

核磁共振波谱学是当前研究分子结构和反应机制的最有力的和用途最广的技术之一. 由诺贝尔奖得主 R. R. Ernst 及其合作者花多年心血写成的此书是核磁共振研究领域的一本权威著作. 本书深入剖析了一维和二维核磁共振原理. 其主要内容包括核自旋动力学、核自旋哈密顿量的处理方法、一维和二维傅里叶核磁共振波谱学, 多量子跃迁及核磁成像等. 本书的重点是二维傅里叶谱学, 而与此密切相关的核磁成像技术则具有十分重要的和广阔的应用.

本书为从事核磁共振研究的专业人员不可缺少的理论工具书, 可供应用核磁共振的研究人员, 研究生和物理、化学、生物学以及医学专业的高校师生参考.

图书在版编目(CIP)数据

一维和二维核磁共振原理/(瑞士)恩斯特(Ernst, R. R.)等著;毛希安译. —北京:科学出版社, 1997

书名原文: Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions

ISBN 7-03-005570-5

I. 一… II. ①恩… ②毛… III. 核磁共振-理论 N. O571.41

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (96) 第 17644 号

科学出版社出版

北京东黄城根北街 15 号

邮政编码: 100717

北京科地亚印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1997 年 10 月第 一 版 开本: 850×1168 1/32

1997 年 10 月第一次印刷 印张: 22 5/8

印数: 1—1 000

字数: 582 000

定 价: 56.00 元

Richard R. Ernst, Geoffrey Bodenhausen, and Alexander
Wokaun

PRINCIPLES OF NUCLEAR MAGNETIC RESO-
NANCE IN ONE AND TWO DIMENSIONS

Oxford University Press 1987

© Richard R. Ernst, Geoffrey Bodenhausen, and Alexander Wokaun
1987

本书中译本经牛津大学出版社授权出版限在中华人民共和国
发行

This translation of Principles of Nuclear Magnetic Resonance
in One and Two Dimensions originally published in English in
1987 is published by arrangement with Oxford University Press.

*For sale in the People's Republic of China only and not for
export.*

译者的话

1991年10月,从斯德哥尔摩传出一个消息,当年的诺贝尔化学奖授予瑞士苏黎世联邦高等工业学校的 R. R. Ernst 教授,全球的核磁共振波谱工作者无不为之振奋。

核磁共振(NMR)是本世纪中叶发现的低能电磁波(无线电波)与物质相互作用的一种基本物理现象。NMR 的发现是本世纪物理学发展史上的一件大事,因此 1939 年气态 NMR 实验的成功和 1945 年凝聚态 NMR 实验的成功都荣获了诺贝尔物理学奖。NMR 证明了核自旋的存在,为量子力学的一些基本原理提供了直接的验证,并且首次实现了能级反转,首次实现了烧洞实验,这些为激光的产生和发展奠定了坚实的基础。此外,NMR 中的自由感应衰减,自旋回波等实验现象引用到光学中后,则发展成为具有重要科学价值的非线性光学。由法国著名物理学家 A. Abragam 于 1961 年出版的专著《核磁学原理》已成为物理学中广泛引用的一本专著。

NMR 的影响远不止于物理学本身。足以引起物理学家妒忌的是,化学家从 NMR 中获得了更多的益处。NMR 在物质结构和分子动态的研究中发挥了不可取代的功能。难以数计的原先无法解决的结构问题得到了解决,原先并不知晓的动态过程得以描述。NMR 把化学研究推向了一个现代化的新阶段。试想,若用普通的化学方法或其它仪器,要证明球碳化合物 C_{60} 中所有的碳都是等价的,不知要花费多少时间和精力。可是固体高分辨 ^{13}C NMR 测出的一条单峰便给出了无可辩驳的证据。更加使当初研制 NMR 实验装置的物理学家们难以想象的是,到如今 NMR 竟然发展成为从微观上可以研究蛋白质分子的溶液构象,从宏观上可以用于人体断层成像的具有非凡功能的科学工具。NMR 能发展

到今天这样辉煌的局面,是全世界科学家共同努力的结果,而 R. R. Ernst 以其对 Fourier 变换(FT)NMR 的创立和对二维 NMR 的发展两项杰出贡献,当之无愧地独享了 1991 年诺贝尔化学奖。

由 R. R. Ernst 教授及其学生(现也都为教授)G. Bodenhausen 博士和 A. Wokaun 博士合作的、于 1987 年出版的《一维和二维核磁共振原理》和 A. Abragam 的《核磁学原理》(均由牛津大学出版社出版)这两本著作,被国际 NMR 领域称为 NMR 发展史上的两块里程碑。如果说《核磁学原理》是连续波 NMR 工作者手头必不可少的参考书的话,那么《一维和二维核磁共振原理》这本书就相当于 FT NMR 工作者朝夕相依的“圣经”。无怪乎国际核磁共振领域的权威刊物《核磁共振杂志》评论说,该书应是“所有自尊的 NMR 谱学家所绝对必要的”。

我国的核磁共振研究虽起步较晚,但一直呈上升趋势,现代化的 FT 谱仪不断被引进。为了帮助我国的 NMR 研究迎头赶上国际先进水平,在国际 NMR 领域占领应有的一席之地,我将这本具有重要国际影响的著作译成了中文,以献给那些正在和立志献身于我国 NMR 事业的人们。

本书的作者 R. R. Ernst 教授一直关心本书中文版的问世。他为本书撰写了中文版序言,并亲自与牛津大学出版社进行了联系,促使了本书中文版的尽早出版。R. R. Ernst 教授是中国人民的老朋友。为了支持我国的 NMR 事业,他先后四次访问我国,并在北京、上海和武汉等地作了系列的 NMR 讲座。

在本书的翻译过程中,叶朝辉教授、沈联芳教授在专业术语的措辞方面提供了许多好的建议,杜有如教授逐字逐句审校了全书的译稿并提出了许多宝贵的意见。在此向他们表示深深的谢意。由于译者水平有限,译文中错误之处在所难免,欢迎读者批评指正。

毛希安

1997 年 3 月

中文版序言

科学,尤其是核磁共振,对我们这个经历如此众多可悲变迁乃至形成了许多相互对抗的敌对集团的世界来说,其影响是均等的.科学真理并不因语言和文化不同而变化,因而有助于为相互了解提供基础.因此,我们非常感谢毛希安博士、叶朝辉教授和沈联芳教授将“Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions”一书细心地译成了中文.我们还十分感谢他们发现并指正了以往英文版本中所存在的一系列错误.我们承认,尽管进行过多次修订,仍然有一些前后不一致的地方我们没有注意到.而中文译本则无疑为当前最可靠的版本.

我们为本书能译成中文感到由衷的高兴.首先,在发展二维波谱学的基础实验过程中,我们曾愉快地同许多中国科学家进行过卓有成效的合作.在此,我们要提及黄永仁教授在二维 NMR 的早期所作出的贡献.其次,中国科学家对 NMR 的兴致在几十年中一直都是浓厚的.我们得到过来自中国科学界的许多反馈和激励.我们相信,这本译著将会在中国找到极为肥沃的土壤.

NMR 的发展仍然是在全速前进中.1985 年写成的专著没跟上当前的重要发展是不足为怪的.我们希望,本书能激励读者去阅读更新的文献,以填补一些难以避免的空白.

R.R. 恩斯特

G. 博登豪森

A. 沃考恩

1993 年 2 月

序

本书的写作经历了一个很长的过程,完全没有想到会成为最后这个样子.起初的出发点只是想编辑一本简短的适时的有关二维波谱学的综述性专论.然而实际的写作不久就超越了原定的计划.我们发现了本来应该发现的东西:同一原理支配着核磁共振现象,而不管是用一维谱还是用二维谱进行研究.

因此本书也就自然发展成包括一维和二维技术的高等 NMR 波谱学的总结性论述,重点是在原理方面而不是实用方面,尽管读者也许会发现在某些章节中,对实用方面的考虑成为主要的. Fourier 波谱学以前所未有的方式将固体和液体 NMR 统一起来了,所以我们便试图讨论与两方面专题都密切相关的原理.

第一章的意图是导言式的,因而只对一些导致现代技艺的历史发展过程提供了甚为粗略的概述.

第二章从运动方程出发,在引入了处理密度算符的适当手段之后,讨论了核自旋系统的动力学.运动方程的驱动项即 Hamiltonian,弛豫超算符和化学交换超算符以 Fourier 谱学的一般描述方式进行了讨论.

核自旋 Hamiltonian 可以容易处理的事实对 NMR 波谱学的成功起了重要作用.第三章简短地讨论了对 NMR“炼金术士”有用的各种工具,例如双共振,多脉冲序列等等.这些实验步骤以平均 Hamiltonian 理论阐述为最佳,这在第三章中对通常的周期性微扰和非周期性微扰两种情况都作了处理,而非周期性微扰在二维波谱学内容中尤为重要.

第四章论及了一维 Fourier 波谱学.开始的一节有助于了解波谱学与最初从电子工程学中发展起来的一般响应理论之间的关系.首先对经典系统中的线性和非线性响应理论进行了讨论,然后

推广到了量子系统中. 一维 Fourier 波谱学的基本特征是可以用品经典的 Bloch 方程进行讨论的, 但耦合的自旋系统的特定方面则需要用量子力学处理.

在第五章中讨论了多量子跃迁的基本性质, 包括对连续波检测的简短的评论, 以便能与更强有力的二维技术相比较. 多量子相干的激发和演化也在第五章中作了讨论, 而二维多量子谱的实际应用则推移到第八章.

在第六章中, 以一般的方式讨论了二维波谱学的原理. 第七章对使几种相互作用如化学位移和耦合得以分离的各种方法作了评述. 第八章讨论了以相干转移为基础的二维相关方法, 而对动态过程, 如化学交换和交叉弛豫的研究则在第九章中进行总结. 最后, 第十章简单地叙述了 NMR 的成像原理. 由于许多成像方法采用了二维波谱学的概念, 看来在本书中讨论这些原理是适宜的.

我们希望本书有助于满足那些希望加深对时域波谱学的基本特性的理解 和那些希望应用近期发展起来的一维和二维波谱手段的 NMR 波谱学家的要求.

我们力图以直观的方式, 同时又是在严谨的数学框架中展示本书内容, 以满足广大读者的口味. 很明显, 不作出许多让步, 这是不可能达到的.

我们要深深地感谢那些帮助我们将兴趣引向时域波谱学领域的人们. Hans Primas 教授在数学工具和基本概念方面为我们作出了许多贡献. Weston A. Anderson 博士曾鼓励我们对更为灵敏的 NMR 方法的研究, 从而导致了 Fourier 波谱学的诞生. Jean Jeener 教授首先提出了在二维中实验波谱的思想.

非常感谢我们的同事们, 他们出了许多主意, 修正了糊涂的概念, 进行了数不清的漂亮的实验. 特别要感谢 Walter P. Aue, Peter Bachmann, Enrico Bartholdi, Lukas Braunschweiler, Peter Brunner, Douglas P. Burum, Pablo Caravatti, Christopher J. R. Counsell, Gerhard W. Eich, Christian Griesinger, Alfred Höhener, Yong-Ren Huang (黄永仁), Jiri Karhan, Herbert

Kogler, Roland Kreis, René O. Kühne, Anil Kumar, Malcolm H. Levitt, Max Linder, Andrew A. Maudsley, Slobodan Macura, Beat H. Meier, Beat U. Meier, Anita Minoretti, Luciano Müller, Norbert Müller, Kuniaki Nagayama, Peter Pfändler, Umberto Piantini, Christian Radloff, Mark Rance, Michael Reinhold, Thierry Schaffhauser, Günther Schatz, Stephan Schäublin, Christian Schönenberger, Ole W. Sørensen, Dieter Suter 和 Stephen C. Wimperis. 我们还要提一提与 Kurt Wüthrich 和 Gerhard Wagner 的卓有成效的合作。

感谢世界各国的许多作者,不仅仅因为他们友善地允许从他们的论文中复制图谱,而且还因为与他们进行过的令人振奋的讨论以及他们对他们自己贡献的许多概念的澄清. 特别具有激励意义的是与 Ad Bax, Philip H. Bolton, Ray Freeman, Robert G. Griffin, Jean Jeener, Horst Kessler, Alex Pines, Robert L. Vold, Regitse R. Vold, John S. Waugh 及其研究小组中的成员的接触.

Irène Müller 小姐和 Dorothea Spörri 女士细心地打印了数目巨大的稿样. 没有她们的耐心,本书是难以写成的.

R. R. 恩斯特

G. 博登豪森

A. 沃考恩

1985 年 3 月于苏黎世

符号、变换和缩略语

符号

$\mathbf{A}$	(黑体字): 矢量
$\mathbf{A}$	(黑体字): 矩阵
a_{kl}	归一化的交叉峰积分强度, (9. 3. 17) 式
$a(\omega)$	Lorentzian 吸收型信号, (4. 2. 19) 式
$a_{rs}(\omega_1), a_{rs}(\omega_2)$	与 $ r\rangle \rightarrow s\rangle$ 跃迁有关的 ω_1 域和 ω_2 域的 Lorentzian 吸收型信号, (6. 5. 5) 式
B	磁感应强度, 简单地称为“磁场”
$\mathbf{B}$	磁场矢量
B_0	静磁场, (4. 2. 3) 式
B_1, B_{rf}	射频场, (4. 2. 5) 式
ΔB_0	偏置场, (4. 2. 21) 式
B_{eff}	有效场, (4. 2. 22) 式
b_{kl}	偶极耦合的空间部分, (2. 2. 16) 式
D_{kl}	偶极耦合张量, (2. 2. 15) 式
$D_{m' m}^l$	Wigner 旋转矩阵元, (2. 1. 146) 式
$d(\omega)$	Lorentzian 色散信号, (4. 2. 19) 式
$d_{rs}(\omega_1), d_{rs}(\omega_2)$	与 $ r\rangle \rightarrow s\rangle$ 跃迁有关的 ω_1 域和 ω_2 域的 Lorentzian 色散型信号, (6. 5. 5) 式
F_x, F_y, F_z	总角动量自旋算符的 Cartesian 分量, (2. 1. 44) 式
$\mathcal{F}$	Fourier 变换
$\mathcal{F}^c, \mathcal{F}^s$	余弦和正弦 Fourier 变换
$g^{(q, q')}(\tau), g^{(q)}(\tau)$	相关函数, (2. 3. 9) 式和 (2. 3. 14a) 式
$H(\omega)$	频率响应函数, (4. 1. 14) 式
$H(p)$	转移函数, (4. 1. 13) 式
$\mathcal{H}_{rs}$	$\mathcal{H}$ 的矩阵元
$\mathcal{H}_{rs tu}$	Hamiltonian 超算符矩阵表示的矩阵元, (2. 1. 37) 式

$\hat{\mathcal{H}}$	Hamiltonian 超算符(Liouville 超算符), (2. 1. 54)式
$h(t)$	冲激响应函数, (4. 1. 7)式
$h(t), h(t_1, t_2)$	时域权函数, (4. 3. 2)和(6. 8. 3)式
$\hbar = h/(2\pi)$	Planck 常量
$\mathcal{H}$	Hilbert 变换
$\mathcal{H}$	Hilbert 空间
$\mathcal{H}$	Hamilton 算符
$\mathcal{H}$	Hamilton 算符的矩阵表示
$I_0(\theta)$	零级修正 Bessel 函数, (4. 1. 39)式
I_{kl}	交叉峰积分强度, (9. 3. 16)式
I_{kx}, I_{ky}, I_{kz}	角动量自旋算符的 Cartesian 分量
J_{kl}	各向同性标量自旋-自旋耦合常量, 以 Hz 为单位
$J(\omega), J^{(q,q')}(\omega), J^{(q)}(\omega)$	功率谱密度函数, (2. 3. 12)和(2. 3. 14b)式
$J_{kl}(\omega)$	k, l 相互作用的功率谱密度函数, (9. 4. 9)式
$J_{\kappa\lambda\mu}(\omega)$	功率谱密度函数, (2. 3. 22)式
J_{kl}	间接自旋-自旋耦合张量, (2. 2. 11)式
$K_{ji} = k_{ij}$	反应 $[A_i] \rightarrow [A_j]$ 的一级速率常量, (2. 4. 12)式
K	交换矩阵
k	Boltzmann 常量
L	总自旋量子数, (5. 1. 3)式
$L = K - R$	见(2. 4. 23)式
$L^+ = i\Omega - \Lambda + K$	见(2. 4. 22)式
$\hat{L}$	Liouville 超算符
$\mathcal{L}$	Liouville 空间
$\mathcal{L}^c$	复合 Liouville 空间, (2. 4. 33)式
M_k	自旋 I_k 的磁量子数
M_a	态 $ a\rangle$ 的磁量子数
$M^+ = M_x + iM_y$	复磁化强度, (4. 2. 16)式
M_0	平衡磁化强度(纵向分量)
M_∞	稳态磁化强度(纵向分量), (4. 2. 34)和(4. 6. 5)式
$\Delta M = M_z - M_0$	对平衡磁化强度的偏离
$\Delta M_{ab} = M_a - M_b$	态 $ a\rangle$ 和 $ b\rangle$ 之间的量子数差

M	磁化强度矢量(M_x, M_y, M_z), (2.3.1)式
M^+	复磁化强度矢量($M_1^+, M_2^+, \dots, M_n^+$), (2.4.20)式和(9.3.1)式
M_z	纵向磁化强度分矢量($M_{1z}, M_{2z}, \dots, M_{nz}$), (2.4.21)式
M_0	平衡时纵向磁化强度分矢量($M_{10}, M_{20}, \dots, M_{n0}$), (2.4.21)式
$\Delta M = M_z - M_0$	见(2.4.25)式
N	分子中的自旋数
N, N^+, N^-	计量关系矩阵, (2.4.7)式
P_a	态 $ a\rangle$ 的布居度, (2.1.10)式
P_i	投影算符, (2.1.69)式
P	布居度矢量
P_0	平衡时布居度矢量
p	相干阶数, (2.1.11)式
p_{ab}	相干阶数 $ a\rangle\langle b $
Δp_i	在传播子 U_i 的作用下相干阶数的变化, (6.3.8)式
Δp	$\{\Delta p_i\}$ 矢量, (6.3.18)式
Q_k	自旋 I_k 的四极耦合张量, (2.2.20)式
q	相干中涉及到的自旋数, (5.3.31)式
q	积算符中的项数, (2.1.87)式
R	旋转算符, 么正变换算符
$R_{\alpha\alpha'\beta\beta}$	Redfield 弛豫矩阵元, (2.3.21)式
R_C	交叉弛豫速率常量, (9.3.21)式
R_L	漏损弛豫速率常量, (9.3.21)式
R	旋转算符 R 的矩阵表示
R	弛豫矩阵, (2.3.2)式
R_x, R_y, R_z	旋转矩阵, (4.2.25)和(4.2.49)式
$\hat{R}$	么正变换超算符, (2.1.62)式
T_1	纵向弛豫时间
T_2	横向弛豫时间(均匀贡献)
$1/T_2$	均匀弛豫速率常量
$1/T_2^+$	非均匀衰减速率常量

$1/T_2^*$	横向磁化强度总衰减速率常量
$1/T_2^u$	绝热弛豫速率常量, (2. 3. 28) 式
$1/T_2^{na}$	非绝热弛豫速率常量, (2. 3. 29) 式
T_{lm}	不可约张量算符分量, (2. 1. 146) 式
U	么正传播子
$u(\omega)$	复数谱的色散分量, (4. 2. 18) 式
$v(\omega)$	复数谱的吸收分量, (4. 2. 18) 式
W_{ij}	W 矩阵元, 态 $ i\rangle$ 和 $ j\rangle$ 之间的跃迁概率
W_{ij}^{AB}	由 AB 偶极相互作用产生的对 W_{ij} 的贡献
W_{ij}^{RF}	由外部无规场产生的对 W_{ij} 的贡献
$W_0, W_1, W_2,$	零量子, 单量子和双量子跃迁概率
$W_0^{AB}, W_1^{AB}, W_2^{AB}$	由 AB 偶极相互作用产生的对 W_0, W_1 和 W_2 的贡献
W_1^{RF}	由外部无规场产生的对 W_1 的贡献
W	跃迁概率矩阵, (2. 3. 3) 式
α	自旋态 $ M=+1/2\rangle$
β	自旋态 $ M=-1/2\rangle$
β	射频脉冲转角, (4. 2. 13) 式
β_{eff}	有效 β , (4. 2. 24) 式, (5. 3. 12) — (5. 3. 15) 式
β_{opt}	最佳 β , (4. 2. 36) 式和 (4. 2. 41) 式
β_I, β_S	逆自旋温度, (4. 5. 8) 式
β_L	逆晶格温度
$\Gamma_{rs\ tu}$	$\hat{\Gamma}$ 矩阵表示的矩阵元, (2. 1. 36) 式
$\hat{\Gamma}$	弛豫超算符, (2. 1. 34) 式
γ	旋磁比
$\Delta_{rs\ tu}$	自旋翻转数, (4. 4. 51) 式
η	增强因子, (4. 5. 13) 式和 (4. 5. 25) 式
η_k	不对称参数, (2. 2. 23) 式
θ	倾斜角, (4. 2. 23) 式
κ	见 (6. 5. 11) 式和 (6. 5. 13) 式
Λ_M	量子数为 M 的态的数目, (5. 1. 4) 式
Λ	横向弛豫矩阵, (2. 4. 22) 式
$\lambda=1/T_2$	半高半宽的均匀贡献

$\lambda^+ = 1/T_2^+$	半高半宽的非均匀贡献
λ^*	半高半宽的全部贡献
$\lambda_{rs}^{(e)}, \lambda_{rs}^{(d)}$	演化期和检测期跃迁 $ r\rangle \rightarrow s\rangle$ 的均匀半宽, (6. 2. 8) 式
λ_+, λ_-	动力学矩阵 L 的本征值, (9. 3. 19) 式
μ_k	$+$, $-$, α 或 β , 见 (5. 3. 31) 式
$\nu_{jl}, \nu_{jl}^+, \nu_{lj}^-$	计量关系矩阵元, (2. 4. 2) 和 (2. 4. 9) 式
$\hat{S}$	交换超算符, (2. 4. 34) 式
$\Xi_{j\alpha\alpha', s\beta\beta'}$	$\hat{S}$ 矩阵表示的矩阵元, (2. 4. 39) 式
ξ_l	反应 l 的反应数, (2. 4. 5) 式
ξ	反应数矢量
ρ	包括晶格在内的系统的密度算符
σ	自旋系统的密度算符, (2. 1. 32) 式
σ_n	时域中方均根噪声幅度, (4. 3. 7) 式
σ_N	频域中方均根噪声幅度, (4. 3. 9) 式
σ_0	平衡密度算符
σ^c	复合密度算符, (2. 4. 32) 式
$\sigma^\square$	依赖于浓度的密度算符, (2. 4. 41) 式
$\sigma(\tau_-), \sigma(\tau_+)$	在 τ 时刻受扰动前后的密度算符
$\sigma(\tau_i^-), \sigma(\tau_i^+)$	用传播子 U_i 作变换前后的密度算符, (6. 3. 4) 式
σ_k	化学屏蔽张量, (2. 2. 1) 式
τ_c	相关时间
τ_c^{kl}	k, l 相互作用的相关时间
φ, ϕ	相位
ϕ	射频相位矢量, (6. 3. 20) 式
χ	比例因子, 见 (9. 4. 14) 和 (9. 6. 1) 式
Ω	共振相对于载波频率的频率偏置
Ω_k	自旋 I_k 相对于载频的频率偏置 (化学位移)
Ω_{tot}	全谱范围, (4. 3. 32) 式
$\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$	Euler 角
$\omega_0 = -\gamma B_0$	实验室坐标系中的 Larmor 频率

$\omega_{0k} = -\gamma_k(1-\sigma_k)B_0$	实验室坐标系中自旋 I_k 的 Larmor 频率, (2.2.2)式
$\omega_{\alpha\beta}$	实验室坐标系中跃迁 $ \alpha\rangle \rightarrow \beta\rangle$ 的频率, (2.3.4)式
ω_{rs}	跃迁 $ r\rangle \rightarrow s\rangle$ 相对于载频的频率偏置
$\omega_p^{(q)}$	见(2.3.10)式
$\omega_{rs}^{(e)}, \omega_{rs}^{(d)}$	跃迁 $ r\rangle \rightarrow s\rangle$ 在演化期和检测期相对于载频的频率偏置, (6.2.9)式
$\Delta\omega_{rs}^{(e)}, \Delta\omega_{rs}^{(d)}$	在演化期和检测期相对于共振 $\omega_{rs}^{(e)}, \omega_{rs}^{(d)}$ 的频率偏置, (6.5.3)式
$\Delta\omega = \omega - \Omega$	相对于共振频率的频率偏置
$\Delta\omega_k = \omega - \Omega_k$	相对于自旋 I_k 的共振频率的频率偏置
$\Delta\omega_1 = \omega_1 - \omega_{rs}^{(e)}$	相对于演化期跃迁 $ r\rangle \rightarrow s\rangle$ 共振频率的频率偏置
$\Delta\omega_2 = \omega_2 - \omega_{rs}^{(d)}$	相对于检测期跃迁 $ r\rangle \rightarrow s\rangle$ 共振频率的频率偏置
1	单位算符
a^*	a 的复共轭
$A^\dagger$	A 的伴随算符 ($A_{rs}^\dagger = A_{sr}^*$)
$\tilde{A}$	A 的转置矩阵
$\xrightarrow{\mathcal{H}\tau}$	么正变换 $U = \exp\{-i\mathcal{H}\tau\}$ 的简号表示, 见(2.1.65)式
$\oplus$	直和
$\otimes$	直积
$a \times b$	矢积
$a \cdot b$	标积
$\in$	属于
$\propto$	正比于

旋转和基变换的习惯

(a)由么正变换 R 诱导的旋转

波函数变换: $\psi' = R\psi$.

算符变换: $A' = RAR^{-1}$.

对于绕 x 轴角度为 β 的正旋转, R 由 $R = \exp\{-i\beta F_x\}$ 给出, 因此 $A' = \exp\{-i\beta F_x\} A \exp\{i\beta F_x\}$.

(b)由么正基变换 T 诱导的变换

原始基函数: $(\tilde{\phi}) = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n)$.

变换基函数: $(\tilde{\phi}^T) = (\phi_1^T, \phi_2^T, \dots, \phi_n^T)$,

其中

$$(\tilde{\phi}^T) = (\tilde{\phi})T.$$

任意波函数 ψ 的展开系数

$$\psi = \sum_i \phi_i c_i = \sum_i \phi_i^T c_i^T$$

变换如下

$$c^T = T^{-1}(c).$$

算符 A 在经变换的坐标系中的表示为

$$A^T = T^{-1}AT.$$

缩略语

CSA	化学屏蔽各向异性
CW	连续波
eff	有效
FID	自由感应衰减
lab	实验室坐标系
NOE	核 Overhauser 效应
opt	最佳
ρ QT	ρ 量子跃迁
rf	射频, 无线电频率
S/N	信噪比
ZQT	零量子跃迁