

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

Физический факультет
Кафедра химической и биологической физики



Согласовано, декан ФФ

Блинов В.Е.

2025 г.

Рабочая программа дисциплины

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

направление подготовки: **03.04.01 Прикладные математика и физика**

направленность (профиль): **все профили**

Форма обучения

Очная

| Семестр | Общий объем | Виды учебных занятий (в часах) | | | | Промежуточная аттестация (в часах) | | | | |
|--|----------------|---|-------------------------|---------------------------|--|---|--|-------|-------------------------------|---------|
| | | Контактная работа обучающихся с преподавателем | | | Самостоятельная ра- бота, не включая период сессии | Самостоятельная подго- товка к промежуточной аттестации | Контактная работа обучающихся с преподавателем | | | |
| | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные за- нятия | | | Консультации | Зачет | Дифференциро- ванный зачет | Экзамен |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 |
| 2 | 72 | 16 | 16 | | 18 | 18 | 2 | | | 2 |
| Всего 72 часа / 2 зачетные единицы из них: | | | | | | | | | | |
| - контактная работа 36 часов | | | | | | | | | | |
| Компетенции ПК-1 | | | | | | | | | | |

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2025

Содержание

| | |
|---|----|
| 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы. | 3 |
| 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы. | 4 |
| 3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу. | 4 |
| 4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий. | 5 |
| 6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся. | 6 |
| 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины..... | 7 |
| 8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине. | 7 |
| 9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине..... | 7 |
| 10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине. | 8 |
| Аннотация..... | 14 |

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Цель учебного курса «Современные методы магнитного резонанса» – обучение слушателей основам базовых теорий и моделей современных методов ЭПР и ЯМР спектроскопии, их применению для определения различных физико-химических свойств веществ, а также получение слушателями практических навыков использования полученных знаний в области химической физики и биофизики.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

| Результаты освоения образовательной программы (компетенции) | Индикаторы | Результаты обучения по дисциплине |
|---|--|--|
| ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. | ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. | Знать основные приближения, уравнения и основные методы стационарной и импульсной ЭПР и ЯМР спектроскопии; существующие программные пакеты для численных расчетов и обработки ЭПР спектров. Уметь определять наиболее подходящий экспериментальный метод ЭПР и ЯМР для исследования конкретной системы; определять различные физико-химические параметры на основе экспериментальных данных ЭПР и ЯМР. Владеть основными понятиями ЭПР спектроскопии; навыками постановки и решения научных задач методами импульсной ЭПР спектроскопии, в том числе в высоких магнитных полях, методами модуляции электронного спинового эха (ESEEM, HYSCORE), методами импульсного двойного электрон-ядерного резонанса (ENDOR), в том числе с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR), методами детектирования сигнала ЯМР на основе импульсного двойного электронного резонанса (ELDOR-detected NMR), одночастотными и двухчастотными методами дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, SIFTER, 2+1, DQC, RIDME, RE), методами ЭПР на основе импульсов произвольной формы, методами оптического и электрического детектирования ЭПР, методом детектирования ЭПР |

| Результаты освоения образовательной программы (компетенции) | Индикаторы | Результаты обучения по дисциплине |
|---|------------|---|
| | | отдельных молекул, методами ЭПР томографии и спиновых зондов. |

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Современные методы магнитного резонанса» реализуется для обучающихся по направлению подготовки **03.04.01 Прикладная математика и физика**. Курс относится к циклу специальных дисциплин кафедры химической и биологической физики. В нем рассматриваются теоретические основы и экспериментальные методы ЭПР и ЯМР спектроскопии, позволяющие получить информацию о различных физико-химических свойствах веществ. Особое внимание уделено физическим идеям и принципам, лежащим в основе этих методов и способам их реализации на практике. В результате прохождения курса у студентов кафедры должно сформироваться представление о том, какие экспериментальные методы используются для решения тех или иных задач химической физики и биофизики, какие есть ограничения у этих методов. Эти знания необходимы исследователю в области химической и биологической физики, как для решения задач, так и для понимания научной литературы (статей) в этой области. Необходимыми предпосылками для успешного освоения курса являются следующие:

- В цикле математических дисциплин: знание основ математического анализа и методов математической физики.
- В цикле общеприродоведческих дисциплин необходимыми предпосылками являются знание и умение применять основные принципы классической и квантовой механики, молекулярной и статистической физики.

3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Трудоёмкость дисциплины – 2 з.е. (72 ч)

Форма промежуточной аттестации: 2 семестр – экзамен

Таблица 3.1

| № | Вид деятельности | Семестр |
|----|---------------------------------------|---------|
| | | 2 |
| 1 | Лекции, ч | 16 |
| 2 | Практические занятия, ч | 16 |
| 3 | Лабораторные занятия, ч | |
| 4 | Занятия в контактной форме, ч, из них | 36 |
| 5 | из них аудиторных занятий, ч | 32 |
| 6 | в электронной форме, ч | - |
| 7 | консультаций, час. | 2 |
| 8 | промежуточная аттестация, ч | 2 |
| 9 | Самостоятельная работа, час. | 36 |
| 10 | Всего, ч | 144 |

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Программа и основное содержание лекций (16 часов)

| № п/п | Наименование темы и её содержание | Объем, час |
|--------------|--|-------------------|
| 1 | 1. Спиновый гамильтониан Спиновые взаимодействия в ЯМР и в ЭПР. Феноменологическое описание магнитного резонанса. Вращающаяся система отсчета и векторная модель. | 2 |
| 2 | 2. Импульсы в магнитном резонансе. Принцип работы и элементы современных ЭПР и ЯМР спектрометров. | 2 |
| 3 | 3. 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. | 1 |
| 4 | 4. 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. | 2 |
| 5 | 5. 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. | 1 |
| 6 | 6. Эффекты ядерной модуляции электронного спинового эха. Описание 2-х и 3-х импульсной последовательности ESEEM. Методы HSCORE. Оптимизация методов ESEEM. | 2 |
| 7 | 7. Импульсный двойной электрон-ядерный резонанс (ENDOR). Эксперименты с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR). Методы TRIPLE и ELDOR-detected NMR. | 1 |
| 8 | 8. Основы дипольной ЭПР спектроскопии. Обменное и диполь-дипольное взаимодействия. Двухчастотные методы импульсной дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR). Различные типы спиновых меток, ортогональные метки. Особенности для систем с 3 и более метками. Методы обработки данных дипольного ЭПР. | 2 |
| 9 | 9. Одночастотные методы импульсной дипольной ЭПР спектроскопии, SIFTER, DQC, RIDME, RE). | 1 |
| 10 | 10. Импульсы произвольной формы. Оптимизация импульсных последовательностей. Теория оптимального управления спиновыми системами в ЭПР. | 2 |

Программа практических занятий (16 часов)

| № п/п | Наименование темы и её содержание | Объем, час |
|----------|--|---------------|
| 1 | 1. Примеры последовательностей ЯМР в двух измерениях: COSY, TOCSY, HSQC/HMQC. Магнитный резонанс в трех измерениях: общие принципы и примеры | 2 |
| 2 | 2. Спиновая релаксация. Общая теория релаксации Флуктуации и релаксация, механизмы релаксации. Теория Рэдфилда. T1- и T2-релаксация в двухуровневой системе под действием локальных полей. | 3 |
| 3 | 3. Дипольная релаксация Дипольная релаксация. Кросс-релаксация: эффект Оверхаузера и ядерный эффект Оверхаузера (NOE). Кросс-коррелированная релаксация. Двумерные ЯМР эксперименты: NOESY/EXSY/ROESY, TROSY. | 3 |
| 4 | 4. 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. | 3 |
| 5 | 5. Кросс-поляризация. Усреднение взаимодействий при помощи импульсов (гомоядерный и гетероядерный декаплинг). Рефокусировка взаимодействий (рекаплинг). | 2 |
| 6 | 6. 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 | 3 |

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

| Перечень занятий на СРС | Объем, час |
|--|---------------|
| Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях | 18 часов |
| Подготовка к экзамену | 18 часов |

5. Перечень учебной литературы.

1. Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса: Новосиб гос. Ун-т, Новосибирск, 2021, ISBN 978-5-4437-1017-4 (22 экз.).
2. Керрингтон А., Мак-Лачлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.(9 экз.)

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса: Новосиб гос. Ун-т, Новосибирск, 2021.
2. Arthur Schweiger; Gunnar Jeschke. Principles of pulse electron paramagnetic resonance. Oxford : Oxford Univ. Press, 2001
3. Daniella Goldfarb; Stefan Stoll. EPR spectroscopy: fundamentals and methods. Chichester: Wiley, 2018

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

Не используются.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины «Современные методы магнитного резонанса» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется со-

гласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется по оценочной системе в виде: теоретические опросы, домашние задания для самостоятельного решения, практическая работа по анализу и интерпретации ЭПР-спектров. Оценка знаний, умений, навыков и освоения компетенций обучающимися в рамках текущего контроля может проводиться согласно шкале и критериям, представленным ниже.

Оценка за работу в семестре учитывает активность студента на семинарах, оцениваемую преподавателем, оценки за тестовые задания, проводимые в течение семестра после каждой темы курса.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области Современных методов ЭПР спектроскопии в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене с учётом результатов текущего контроля успеваемости. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию, по билетам, в устной форме. Билет состоит из двух вопросов.

Для получения оценки «отлично» (продвинутый уровень усвоения компетенций) необходимо развёрнуто ответить на два вопроса из билета, аргументированно ответить на дополнительные вопросы. В качестве дополнительного вопроса может быть использована задача, аналогичная задачам из тестовых заданий в течении семестра. Для получения оценки «отлично» необходимо аргументировать алгоритм решения, допускается ошибка в численном ответе.

Для получения оценки «хорошо» (базовый уровень усвоения компетенций) нужно ответить на два вопроса билета, допускается несколько несущественных ошибок. Допускается несколько неточностей или одна-две ошибки в ответах на дополнительные вопросы.

Для получения на устном экзамене оценки «удовлетворительно» (пороговый уровень усвоения компетенций) необходимо ответить хотя бы на один вопрос билета.

Оценка «неудовлетворительно» - уровень усвоения компетенций не сформирован.

Обучающийся, имеющий неудовлетворительные результаты при прохождении промежуточной аттестации, обязан ликвидировать академическую задолженность по дисциплине, согласно установленным факультетом срокам прохождения повторной промежуточной аттестации. Сроки проведения повторной промежуточной аттестации согласовываются с преподавателем и утверждаются распоряжением декана.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

| Код компетенции | Индикатор | Результат обучения по дисциплине | Оценочные средства |
|-----------------|--|---|---|
| ПК-1 | ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. | Знать основные приближения, уравнения и основные методы стационарной и импульсной ЭПР и ЯМР спектроскопии; существующие программные пакеты для численных расчетов и обработки ЭПР спектров. Уметь определять наиболее подходящий экспериментальный метод ЭПР и ЯМР для исследования конкретной системы; определять различные физико-химические параметры на основе экспериментальных данных ЭПР и ЯМР. | Теоретический опрос, проведение контрольных работ, экзамен. |
| | ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. | Владеть основными понятиями ЭПР спектроскопии; навыками постановки и решения научных задач методами импульсной ЭПР спектроскопии, в том числе в высоких магнитных полях, методами модуляции электронного спинового эха (ESEEM, HYSCORE), методами импульсного двойного электрон-ядерного резонанса (ENDOR), в том числе с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR), методами детектирования сигнала ЯМР на основе импульсного двойного электронного резонанса (ELDOR-detected NMR), одночастотными и двухчастотными методами дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, SIFTER, 2+1, DQC, RIDME, RE), методами ЭПР на основе импульсов произвольной формы, методами оптического и электрического детектирования ЭПР, методом детектирования ЭПР отдельных молекул, методами ЭПР томографии и спиновых зондов. | Теоретический опрос, проведение контрольных работ, экзамен. |

Таблица 10.2

| Критерии оценивания результатов обучения | Шкала оценивания |
|--|-------------------|
| <p><u>Устный опрос:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – ответ наполнен теоретическим и фактическим материалом, подкрепленными ссылками на научную литературу и источники, – полнота понимания и изложения причинно-следственных связей, – осмысленность, логичность и аргументированность изложения материала, – точность и корректность применения терминов и понятий, – ответ дан полностью. <p>Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы. В ответе обучающийся мог допустить не принципиальные неточности.</p> <p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – не менее 95% ответов должны быть правильными. <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, отсутствие затруднений в объяснении процессов и явлений, а также при формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий, – наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы. <p>При изложении ответа на вопрос(ы) преподавателя обучающийся мог допустить не принципиальные неточности.</p> | Отлично |
| <p><u>Устный опрос:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – ответ наполнен теоретическим и фактическим материалом, подкрепленными ссылками на научную литературу и источники, – неполнота реализации выбранных методов, – полнота понимания и изложения причинно-следственных связей, – осмысленность, логичность и аргументированность изложения материала, наличие затруднений в формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий, при наличии незначительных ошибок, – ответ дан полностью. <p>Отвечает на дополнительные вопросы. В ответе обучающийся мог допустить не принципиальные неточности.</p> <p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – не менее 80% ответов должны быть правильными. <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, наличие затруднений в объяснении отдельных процессов и явления, а также при формулировке собственных суждений, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок, – наличие полных ответов на дополнительные вопросы с возможным присутствием ошибок. | Хорошо |
| <p><u>Устный опрос:</u></p> | Удовлетворительно |

| | |
|--|-----------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none"> – теоретический и фактический материал в слабой степени подкреплён ссылками на научную литературу и источники, – частичное понимание и неполное изложение причинно-следственных связей, – осмысленность в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, – корректность применения терминов и понятий, при наличии незначительных ошибок, – фрагментарность раскрытия темы. <p>При ответах на вопросы допускает ошибки.</p> <p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – не менее 50% ответов должны быть правильными. <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – теоретический и фактический материал в слабой степени подкреплён ссылками на научную литературу и источники, – частичное понимание и неполное изложение причинно-следственных связей, – самостоятельность и осмысленность в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, в объяснении процессов и явлений, а также затруднений при формулировке собственных суждений, – корректность применения терминов и понятий, при наличии незначительных ошибок, – наличие неполных и/или содержащих существенные ошибки ответов на дополнительные вопросы. | |
| <p><u>Устный опрос:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – отсутствие теоретического и фактического материала, подкреплённого ссылками на научную литературу и источники, – непонимание причинно-следственных связей, – компилятивное, неосмысленное, нелогичное и неаргументированное изложение материала, – грубые ошибки в применении терминов и понятий, – фрагментарность раскрытия темы, – неподготовленность ответа на основе предварительного изучения литературы по темам, неучастие в коллективных обсуждениях в ходе практического (семинарского) занятия. <p><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – присутствие многочисленных ошибок (более 70% ответов содержат ошибки). <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – фрагментарное и недостаточное представление теоретического и фактического материала, не подкреплённое ссылками на научную литературу и источники, – непонимание причинно-следственных связей, – отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала, – грубые ошибки в применении терминов и понятий, – отсутствие ответов на дополнительные вопросы. | <p><i>Неудовлетворительно</i></p> |

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры некоторых типовых заданий для самостоятельного решения для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся.

1. Предложить схему фазового циклирования для 3-х импульсного эксперимента ESEEM
2. Построить спектр для спиновой системы $S=1/2$, $I=1$ ($A_{\text{св}}=15$ Гс), наблюдаемый на линии ЭПР с $m_I=0$ в эксперименте ELDOR-detected NMR в W-диапазоне
3. Построить спектр HYSORE для спиновой системы $S=1/2$, $I=1/2$ с $g=2$ в X-диапазоне ЭПР
а) в случае СТВ с протоном ^1H , где $A_{\text{H}}=[-3, -3, 10]$ МГц; б) в случае СТВ с азотом ^{15}N , где $A_{\text{N}}=[9, 9, 12]$ МГц;

Примерные вопросы на экзамен

- Спиновый гамильтониан. Основные взаимодействия в ЭПР. Резонансное поглощение. Спектры ЭПР в жидкости и в твердом теле.
2. Релаксация электронных спинов в твердом веществе и в замороженных растворах. Ключевые механизмы и температурные зависимости релаксации.
 3. Основные типы ЭПР экспериментов (стационарный и импульсный ЭПР) и модели их описания.
 4. Принцип работы и элементы современных ЭПР спектрометров.
 5. Матрица плотности. Уравнение Лиувилля - фон Неймана. Формализм спиновых операторов.
 6. Эффекты ядерной модуляции электронного спинового эха. Описание 2-х и 3-х импульсной последовательности ESEEM. Методы HYSORE. Оптимизация методов ESEEM.
 7. Импульсный двойной электрон-ядерный резонанс (ENDOR). Эксперименты с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR).
 8. Методы TRIPLE и ELDOR-detected NMR.
 9. Основы дипольной ЭПР спектроскопии. Обменное и диполь-дипольное взаимодействия. Измерение межспиновых расстояний методами стационарного ЭПР.
 10. Методы импульсной дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, SIFTER, 2+1, DQC).
 11. Методы импульсной дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, RIDME, RE).
 12. Различные типы спиновых меток, их спектроскопические свойства и особенности применения. Ориентационная селективность. Ортогональные метки. Особенности для систем с 3 и более метками.
 13. Методы обработки данных дипольного ЭПР. Достоверность получаемых функций распределения по расстояниям.
 14. Импульсы произвольной формы. Оптимизация импульсных последовательностей. Теория оптимального управления спиновыми системами в ЭПР.
 15. Особенности ЭПР ионов переходных и редкоземельных металлов. ЭПР в обменно-связанных системах.
 16. ЭПР в проводящих системах.
 17. Стационарный и импульсный ЭПР в высоких магнитных полях. Чувствительность и разрешение. Релаксация в высоких полях.
 18. Альтернативные схемы регистрации ЭПР. Оптическое детектирование. Детектирование ЭПР отдельных молекул. Электрическое детектирование в ЭПР.
 19. Основы ЭПР томографии. Спиновые зонды. Примеры применения в биологии и медицине

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС ВО, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Современные методы магнитного резонанса»**

| № | Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа) | Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ | Подпись ответственного |
|---|--|--|------------------------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |

Аннотация

к рабочей программе дисциплины курса
«Современные методы магнитного резонанса»
 направление: **03.04.01 Прикладные математика и физика**
 направленность (профиль): **все профили**

Программа дисциплины «Современные методы магнитного резонанса» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО к уровню магистратуры по направлению подготовки **03.04.01 Прикладные математика и физика**, а также задачами, стоящими перед Новосибирским государственным университетом по реализации Программы развития НГУ. Дисциплина реализуется на физическом факультете Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ) кафедрой химической и биологической физики в качестве дисциплины по выбору. Дисциплина изучается студентами второго курса магистратуры физического факультета в весеннем семестре.

Цель курса – знакомство с передовыми методами ЭПР и ЯМР спектроскопии, широко применяемыми в современной химической и биологической физике.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

| Результаты освоения образовательной программы (компетенции) | Индикаторы | Результаты обучения по дисциплине |
|---|---|--|
| ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. | <p>ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p> <p>ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p> | <p>Знать основные приближения, уравнения и основные методы стационарной и импульсной ЭПР и ЯМР спектроскопии; существующие программные пакеты для численных расчетов и обработки ЭПР спектров.</p> <p>Уметь определять наиболее подходящий экспериментальный метод ЭПР и ЯМР для исследования конкретной системы; определять различные физико-химические параметры на основе экспериментальных данных ЭПР и ЯМР.</p> <p>Владеть основными понятиями ЭПР спектроскопии; навыками постановки и решения научных задач методами импульсной ЭПР спектроскопии, в том числе в высоких магнитных полях, методами модуляции электронного спинового эха (ESEEM, HYSCORE), методами импульсного двойного электрон-ядерного резонанса (ENDOR), в том числе с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR), методами детектирования сигнала</p> |

| Результаты освоения образовательной программы (компетенции) | Индикаторы | Результаты обучения по дисциплине |
|---|------------|--|
| | | ЯМР на основе импульсного двойного электронного резонанса (ELDOR-detected NMR), одночастотными и двухчастотными методами дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, SIFTER, 2+1, DQC, RIDME, RE), методами ЭПР на основе импульсов произвольной формы, методами оптического и электрического детектирования ЭПР, методом детектирования ЭПР отдельных молекул, методами ЭПР томографии и спиновых зондов. |

Курс рассчитан на один семестр (2-й). Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, задачи для самостоятельного решения, консультации, самостоятельная работа студента, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: решение задач из задания для самостоятельного решения

Промежуточная аттестация: экзамен

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **72** академических часа / **2** зачетные единицы.