

**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 физических методов исследования твёрдого тела



УТВЕРЖДАЮ
Декан ФФ, д.ф.-м.н
В.Е.Блинов
2022 г.

Рабочая программа дисциплины
ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ ТВЁРДОГО ТЕЛА

направление подготовки: **03.04.02 Физика**
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
3	72	16	16		22	14	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2022

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	5
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	6
5. Перечень учебной литературы.	10
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	11
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	11
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	12
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	12
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	12

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

Дисциплина «**ЯМР спектроскопия твердого тела**» имеет своей целью обучение магистрантов-физиков современным магнитно-резонансным методам исследования твердых веществ в радиоволновом диапазоне.

Характерной особенностью курса ЯМР спектроскопии в твердом теле в сравнении с традиционными радиоспектроскопическими курсами, которые охватывают ЯМР спектроскопию растворов и ЭПР спектроскопию, является предоставление обучающимся углубленной информации о современных возможностях твердотельного ЯМР. В настоящее время – это мощный метод, позволяющий на молекулярном уровне получать детальную информацию о локальном окружении ядра (координационное число, искажение локального окружения, расстояния между ядрами и т.д.) для кристаллических и аморфных систем. Метод ЯМР спектроскопии в твердом теле стал одним из основных методов в исследовании строения биологических систем, в определении строения неорганических и органических объектов. Он имеет большое прикладное значение в полимеризации, в медицине (ЯМР-томография), в геологии (ЯМР-каротаж) и т.д. Предлагаемый курс имеет целью предоставить обучающимся информацию о современных методах ЯМР спектроскопии твердого тела для исследования строения веществ и материалов, а также об аппаратном и программном обеспечении ЯМР исследований.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<p>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>	<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 теоретические основы ЯМР спектроскопии твердого тела. Основы спиновой алгебры, формализм неприводимых тензорных операторов, переход во вращающуюся систему координат, законы преобразования для мультипликативных спиновых операторов. Уравнения Блоха, классический и квантовый случай. Быстрое и медленное прохождение магнитного резонанса, адиабатические эффекты. Использование формализма матрицы плотности (МП) в ЯМР. Основные соотношения для МП, кинетическое уравнение для МП. Формальный учет спиновой релаксации в формализме МП. Импульсное возбуждение сигнала ЯМР. Вывод общего выражения для сигнала ЯМР на основе теоремы взаимности в электродинамике. Метод Кубо и Томиты, представление формы сигнала ЯМР через функцию отклика. Теорему о соответствии формы сигналов ЯМР при импульсном и непрерывном воз-</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		<p>буждении, условия её применимости. Проявление диполь-дипольного взаимодействия ядер в спектрах ЯМР. Методы подавления (восстановления) диполь-дипольных взаимодействий в ЯМР. Ядерное квадрупольное взаимодействие (ЯКВ) для ядер со спином более $\frac{1}{2}$ и его проявление в ЯМР спектрах. Микроскопическую природа тензора ЯКВ, связь его компонент с локальными градиентами электростатического потенциала. Метод среднего гамильтониана и родственные методы. Формирование спада сигнала свободной индукции при быстром вращении образца под произвольным углом к магнитному полю. Особенности ядер различных элементов периодической системы, с полуцелым ($I = 1/2; 3/2; 5/2; 7/2; 9/2$) и с целым спином ($I = 1$); методы определения ЯМР параметров из экспериментальных спектров и из неэмпирических квантово-механических расчетов. Блок схемы основных узлов импульсного ЯМР спектрометра. Избранные моменты ЯМР исследований в катализе и некоторые специфические и перспективные приложения метода магнитного резонанса.</p> <p>Уметь подбирать импульсные программы для каждого данного ядра и конкретной задачи; обрабатывать спектры ЯМР, полученные с использованием различных методик: MAS, QCPMG, REDOR, SATRAS, и анализировать результаты.</p> <p>Владеть навыками работы с современными программами для расчета спектров ЯМР; навыками проведения экспериментов методом ЯМР спектроскопии; с использованием теоретических основ данного метода.</p>

При подаче материала лекционного курса используется мультимедийная техника. На экран выводятся определения, основные понятия, а также графические иллюстрации, помогающие наглядно подать материал. Все практические занятия проводятся в интерактивной форме. Обсуждаются способы решения поставленных задач, оптимальность предложенных решений. Поощряется элемент соревновательности. Существенным элементом образовательных технологий является не только умение студента найти решение задачи, но и способность доходчиво донести его до всей аудитории. Умение ответить на вопросы сокурсников и преподавателя развивает навыки, которые будут необходимы в дальнейшей профессиональной деятельности студента.

1. Посещение ЯМР спектрометров и томографов в ИК и ИХКГ СО РАН.
2. Подготовка рефератов по разделам дисциплины, по возможности близким к темам магистерских работ слушателей (темы рефератов определяются преподавателем совместно со студентами на первых занятиях курса).
3. Представление и защита рефератов на практических занятиях (презентация и ответы на вопросы со стороны преподавателя и других студентов).

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Курс ЯМР спектроскопии в твердом теле требует предварительной подготовки студентов по электродинамике, квантовой механике, кристаллографии, а также по математике (дифференциальное и интегральное исчисление, основы теории групп и др.). Курс является одной из завершающих дисциплин профессионального цикла подготовки по направлению 03.04.02 Физика. Общая и фундаментальная физика. Он должен предшествовать выполнению квалификационной работы магистранта, т.к. дает ему необходимые знания и навыки для выполнения структурных исследований на высоком современном уровне в процессе подготовки его квалификационной работы.

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.

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
3	72	16	16		22	14	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практиче-

ские занятия, консультации, самостоятельная работа студента и её контроль преподавателями с помощью заданий, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

- текущий контроль успеваемости: сообщения на занятиях, контрольные вопросы;
- промежуточная аттестация: экзамен.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 2 зачетные единицы.

- занятия лекционного типа – 16 часов;
- практические занятия – 16 часов;
- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 22 часа;
- промежуточная аттестация (подготовка к сдаче экзамена, консультации и экзамен) – 18 часов.

Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, групповые консультации, экзамен) составляет 36 часов.

Работа с обучающимися в интерактивных формах составляет 16 часов (практические занятия).

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Консультации перед экзаменом (часов)	Промежуточная аттестация (в часах)	
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)			Сам. работа во время промежуточной аттестации
				Лекции	Практические занятия				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.	Общее введение в ЯМР, специфика твердотельных экспериментов. Спин-гамильтониан ядра в тв. теле, связь ЯМР параметров с молекулярной структурой объекта исследования. Ядра со спином $\frac{1}{2}$: ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F .	1-3	10	3	3	4			
2.	Общая теория ЯМР поглощения и отклика ядерной	4-8	16	5	5	6			

	<p>спиновой системы на импульсное возбуждение в диамагнетиках. Устройство импульсного ЯМР спектрометра. Общее введение в математические методы, используемые в ЯМР твердого тела. Спиновая алгебра, неприводимые тензорные операторы, элементы теории групп, специальные методы стационарной и нестационарной теории возмущений в квантовой механике (контактные преобразования, метод среднего гамильтониана, периодические гамильтонианы, теория Флоке и асимптотические разложения). Ядра со спином $\frac{1}{2}$: ^{29}Si, ^{31}P, ^{77}Se, ^{89}Y, ^{103}Rh, ^{107}Ag, ^{109}Ag, ^{111}Cd, ^{113}Cd.</p>									
3.	<p>Общая теория формирования сигнала ЯМР при импульсном воздействии на систему на примере нескольких импульсных последовательностей. Формирование спада сигнала свободной индукции при быстром вращении образца под углом к</p>	9-12	14	4	4	6				.

	магнитному полю. Методы подавления (восстановления) диполь- дипольных взаимодействий. Ядра со спином $\frac{1}{2}$: ^{115}Sn , ^{117}Sn , ^{119}Sn , ^{123}Te , ^{125}Te , ^{129}Xe , ^{171}Yb , ^{183}W , ^{187}Os , ^{195}Pt , ^{199}Hg , ^{203}Tl , ^{205}Tl , ^{207}Pb .								
4.	Основы ЯМР спектроскопии квадрупольных ядер. Ядра со спином: $3/2$ (^7Li , ^9Be , ^{11}B , ^{23}Na , ^{65}Cu , ^{71}Ga , $^{35/37}\text{Cl}$, $^{79/81}\text{Br}$, ^{87}Br , ^{39}K); $5/2$ (^{27}Al , ^{17}O , $^{47/49}\text{Tl}$, ^{91}Zr , $^{95/97}\text{Mo}$); $7/2$ (^{51}V , ^{45}Sc , ^{43}Ca , ^{133}Cs , ^{139}La); $9/2$ (^{93}Nb , ^{209}Bi); ядра с целым спином: ^2H , ^6Li , ^{14}N . ЯМР в катализе и некоторые специфические и перспективные приложения метода ЯМР.	13-16	14	4	4	6			
5.	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		14				14		
6.	Экзамен		4					2	2
Всего			72	16	16	22	14	2	2

Программа и основное содержание лекций (16 часов)

Лекция 1. Общее введение в ЯМР, специфика твердотельных экспериментов. Спин-гамильтониан ядра в твердом теле, включение электрических квадрупольных взаимодействий в эффективный ядерный спин-гамильтониан. (1 час)

Лекция 2. Связь ЯМР параметров с молекулярной структурой объекта исследования (1 час).

Лекция 3. Экспериментальные особенности ЯМР в твердом теле для распространенных ядер со спином $\frac{1}{2}$: ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F . (1 час)

Лекция 4. Общая теория ЯМР поглощения и отклика ядерной спиновой системы на импульсное возбуждение в диамагнетиках. (1 час)

Лекция 5. Устройство импульсного ЯМР спектрометра. Общее введение в математические методы, используемые в ЯМР твердого тела. (1 час)

Лекция 6. Спиновая алгебра, неприводимые тензорные операторы, элементы теории групп, специальные методы стационарной и нестационарной теории возмущений в квантовой механике. (1 час)

Лекция 7. Особенности ЯМР ядер со спином $1/2$: ^{29}Si , ^{31}P , ^{77}Se , ^{89}Y , ^{103}Rh , ^{107}Ag , ^{109}Ag , ^{111}Cd , ^{113}Cd . (1 час)

Лекция 8. Основы контактных преобразований, метод среднего гамильтониана, периодические гамильтонианы, теория Флоке и асимптотические разложения. (1 час)

Лекция 9. Формирование сигнала ЯМР при импульсном воздействии на систему на примере нескольких, части используемых импульсных последовательностей. (1 час)

Лекция 10. Формирование спада сигнала свободной индукции при быстром вращении образца под углом к магнитному полю. (1 час)

Лекция 11. Интерпретация и расчет статических ЯМР спектров неупорядоченных твердых тел. Сингулярные точки в стационарном спектре ЯМР для квадрупольного ядра со спином I . (1 час)

Лекция 12. Применение принципа взаимности (теоремы взаимности в электродинамике) для расчета абсолютной величины сигнала ЯМР. Теория квадратурного детектирования сигнала в импульсном ЯМР. (1 час)

Лекция 13. Методы подавления (восстановления) диполь-дипольных взаимодействий в спектрах ЯМР. (1 час)

Лекция 14. Основы ЯМР для ядер со спином $1/2$: ^{115}Sn , ^{117}Sn , ^{119}Sn , ^{123}Te , ^{125}Te , ^{129}Xe , ^{171}Yb , ^{183}W , ^{187}Os , ^{195}Pt , ^{199}Hg , ^{203}Tl , ^{205}Tl , ^{207}Pb . (1 час)

Лекция 15. Экспериментальные основы ЯМР спектроскопии квадрупольных ядер. ЯМР спектроскопия квадрупольных ядер со спином: $3/2$ (^7Li , ^9Be , ^{11}B , ^{23}Na , ^{65}Cu , ^{71}Ga , $^{35/37}\text{Cl}$, $^{79/81}\text{Br}$, ^{87}Br , ^{39}K). (1 час)

Лекция 16. Ядра со спином: $5/2$ (^{27}Al , ^{17}O , $^{47/49}\text{Ti}$, ^{91}Zr , $^{95/97}\text{Mo}$); $7/2$ (^{51}V , ^{45}Sc , ^{43}Ca , ^{133}Cs , ^{139}La). Ядра со спином: $9/2$ (^{93}Nb , ^{209}Bi); ядра с целым спином: ^2H , ^6Li , ^{14}N . ЯМР в катализе и некоторые специфические и перспективные приложения метода ЯМР. (1 час)

Программа практических занятий (16 часов)

Занятие 1. Методики определения ЯМР параметров в спектрах ЯМР твердых тел, специфика твердотельных экспериментов. Связь ЯМР параметров с молекулярной структурой объекта исследования. (1 час)

Занятие 2. Определение диполь-дипольного взаимодействия и параметров тензора химического сдвига (ХС) для ядер со спином $1/2$. Диапазоны химического сдвига и анизотропии ХС для ядер: ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F . (1 час)

Занятие 3. Использование формализма неприводимых тензорных операторов для построения эффективных ядерных спин-гамильтонианов. Преобразование спин-гамильтонианов при вращении спиновой системы и при переходе в повернутую систему координат. (1 час)

Занятие 4. Устройство импульсного ЯМР спектрометра. Импульсные программы для записи статических спектров (эхо последовательности, QCPMG). Общая теория формирования сигнала ЯМР при импульсном воздействии на систему на примере нескольких импульсных последовательностей. (1 час)

Занятие 5. Вращение образца под магическим углом (MAS). Формирование спада сигнала свободной индукции при вращении образца под углом к магнитному полю. Импульсные методики для записи спектров MAS. Методики анализа спектров MAS. (1 час)

Занятие 6. Система из двух дипольно взаимодействующих ядер одного или разного сорта. Расчет энергетических уровней в 1-м и 2-м порядке теорий возмущений, нахождение ориентационных зависимостей частот и интенсивностей ЯМР. (1 час)

Занятие 7. Методы подавления (восстановления) диполь-дипольных взаимодействий в ЯМР. Ядра со спином $1/2$: ^{29}Si , ^{31}P , ^{77}Se , ^{89}Y , ^{103}Rh , ^{107}Ag , ^{109}Ag , ^{111}Cd , ^{113}Cd . (1 час)

Занятие 8. Ядра со спином $1/2$: ^{115}Sn , ^{117}Sn , ^{119}Sn , ^{123}Te , ^{125}Te , ^{129}Xe , ^{171}Yb , ^{183}W , ^{187}Os , ^{195}Pt , ^{199}Hg , ^{203}Tl , ^{205}Tl , ^{207}Pb . (1 час)

Занятие 9. Квадрупольные поправки второго порядка теорий возмущений для частот ЯМР переходов. Их учет при расчете положения центра тяжести перехода $m \leftrightarrow (m-1)$ для хаотически ориентированного образца. (1 час)

Занятие 10. Основы ЯМР спектроскопии квадрупольных ядер. Ядра со спином: $3/2$ (^7Li , ^9Be , ^{11}B , ^{23}Na , ^{65}Cu , ^{71}Ga , $^{35/37}\text{Cl}$, $^{79/81}\text{Br}$, ^{87}Br , ^{39}K). (1 час)

Занятие 11. Ядра со спином $5/2$ (^{27}Al , ^{17}O , $^{47/49}\text{Ti}$, ^{91}Zr , $^{95/97}\text{Mo}$). (1 час)

Занятие 12. Ядра со спином $7/2$ (^{51}V , ^{45}Sc , ^{43}Ca , ^{133}Cs , ^{139}La). (1 час)

Занятие 13. Ядра со спином $9/2$ (^{93}Nb , ^{209}Bi). (1 час)

Занятие 14. ЯМР на ядрах с целым спином ($I = 1$): ^2H , ^6Li , ^{14}N . (1 час)

Занятие 15. ЯМР в катализе, некоторые специфические и перспективные приложения метода ЯМР. (1 час)

Занятие 16. ЯМР кристаллография. (1 час)

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	12
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	10
Подготовка к экзамену	14

5. Перечень учебной литературы.

- С.А. Дзюба. Основы магнитного резонанса, НГУ, 2010. - 293с., ISBN 978-5-94356-844-2 (30 экз.)
- А.Керрингтон, Э.Мак-Лечлан. Магнитный резонанс и его применение в химии. М., Мир, 1970 (9 экз.)
- Р.Фримэн. Магнитный резонанс в химии и медицине, М., URSS, 2009., ISBN 978-5-396-00022-3 (1 экз.)
- М.А. Федотов. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии, Москва, Физматлит, 2009., ISBN 978-5-9221-1202-4 (1 экз.)

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

5. Э. Дероум. Современные методы ЯМР для химических исследований, Мир, 1992.
6. Ю.А. Устынюк. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса, Техносфера, Москва, 2016.

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.

избранные интернет-ресурсы (рус)

ЯМР портал СПбУ

<http://nmrportal.ru>

избранные интернет-ресурсы (англ.)

Универсальный интернет портал по спектроскопии ЯМР твердых тел (книги, обзоры, диссертации и пр.)

<http://www.pascal-man.com>

Лекции по спиновой динамике, квантовой химии и математическим методам в магнитном резонансе

http://spindynamics.org/group/?page_id=18

Фурье преобразование и квадратурное детектирование сигнала ЯМР

<http://nmrwiki.org/wiki/images/e/e3/Ft-tutorial-nmurali.pdf>

Практические аспекты применения ЯМР твердого тела в материаловедении и в химических исследованиях

<http://www.dur.ac.uk/solid.service/information/>

журналы и периодические издания

[Annual Reports on NMR Spectroscopy](https://www.springer.com/journal/723)

<https://www.springer.com/journal/723>

[Concepts in Magnetic Resonance A](#)

[Journal of Magnetic Resonance](#)

[Journal of Magnetic Resonance A](#)

[Journal of Magnetic Resonance B](#)

[Journal of Magnetic Resonance \(vol 1-100\)](#)

[Magnetic Resonance in Chemistry](#)

[Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy](#)

Contents of [Volumes 1-50](#) of Progress in NMR Spectroscopy

[Solid State Nuclear Magnetic Resonance](#)

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.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

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

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, 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 согласно «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 в ходе заслушивания сообщений студентов на занятиях в виде презентаций на выбранные темы и ответов на контрольные вопросы.

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 ЯМР спектроскопии в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию по билетам в устной форме. Вопросы билета подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

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

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
<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>Знать теоретические основы ЯМР спектроскопии твердого тела. Основы спиновой алгебры, формализм неприводимых тензорных операторов, переход во вращающуюся систему координат, законы преобразования для мультипликативных спиновых операторов. Уравнения Блоха, классический и квантовый случай. Быстрое и медленное прохождение магнитного резонанса, адиабатические эффекты. Использование формализма матрицы плотности (МП) в ЯМР. Основные соотношения для МП, кинетическое уравнение для МП. Формальный учет спиновой релаксации в формализме МП. Импульсное возбуждение сигнала ЯМР. Вывод общего выражения для сигнала ЯМР на основе теоремы взаимности в электродинамике. Метод Кубо и Томиты, представление формы сигнала ЯМР через функцию отклика. Теорему о соответствии формы сигналов ЯМР при импульсном и непрерывном возбуждении, условия её применимости. Проявление диполь-дипольного взаимодействия ядер в спектрах ЯМР. Методы подавления (восстановления) диполь-дипольных взаимодействий в ЯМР. Ядерное квадрупольное взаимодействие (ЯКВ) для ядер со спином более $\frac{1}{2}$ и его проявление в ЯМР спектрах. Микроскопическую природу тензора ЯКВ, связь его компонент с локальными градиентами электростатического потенциала. Метод</p>	<p>Заслушивание сообщений студентов на занятиях, контрольные вопросы, экзамен</p>

	<p>среднего гамильтониана и родственные методы. Формирование спада сигнала свободной индукции при быстром вращении образца под произвольным углом к магнитному полю. Особенности ядер различных элементов периодической системы, с полуцелым ($I = 1/2; 3/2; 5/2; 7/2; 9/2$) и с целым спином ($I = 1$); методы определения ЯМР параметров из экспериментальных спектров и из неэмпирических квантово-механических расчетов. Блок схемы основных узлов импульсного ЯМР спектрометра. Избранные моменты ЯМР исследований в катализе и некоторые специфические и перспективные приложения метода магнитного резонанса.</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>Уметь подбирать импульсные программы для каждого данного ядра и конкретной задачи; обрабатывать спектры ЯМР, полученные с использованием различных методик: MAS, QCPMG, REDOR, SATRAS, и анализировать результаты. Владеть навыками работы с современными программами для расчета спектров ЯМР; навыками проведения экспериментов методом ЯМР спектроскопии; с использованием теоретических основ данного метода.</p>	<p>Заслушивание сообщений студентов на занятиях, контрольные вопросы, экзамен</p>

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «ЯМР спектроскопия твердого тела».

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6

Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК 1.2	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

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

Примеры тем сообщений:

1. Методы ЯМР высокого разрешения в твердом теле (MAS, REDOR, SATRAS, QCPMG).
2. Двумерная Фурье- спектроскопия.
3. Метод кросс - поляризации (CP MAS). Наблюдение сигнала ЯМР редких ядер.
4. Многоквантовая ЯМР спектроскопия (MQMAS).
5. Практическое применение ЯМР в исследовании твердых тел. Структура, подвижность, кинетика, химическая связь (по выбору).
6. Методы двойного ядерного магнитного резонанса (2D, HETCOR, EXSY).
7. Магниторезонансная томография.
8. МР в квантовых вычислениях.
9. ЯМР в катализе. Массивные катализаторы, поверхность, нанесенные катализаторы, адсорбция, превращения углеводородов –in situ.
10. ЯМР неупорядоченных систем: стекла, жидкие кристаллы, полимеры.
11. ЯМР ^{129}Xe адсорбированного ксенона.
12. ЯМР MOUSE, ЯМР в археологии, ЯМР каротаж (по выбору).

Контрольные вопросы:

1. Что такое квадрупольные взаимодействия?

2. Что такое квадрупольное ядро? Назовите 3-4 квадрупольных ядра и их спины.
3. Что характеризует знак квадрупольного момента ядра?
4. Каков диапазон частот ЯМР?
5. Можно ли наблюдать ЯМР в отсутствии внешнего магнитного поля? Почему?
6. Что такое тензор градиента электрического поля (ГЭП)?
7. Что такое главная компонента и параметр асимметрии тензора ГЭП?
8. Сколько частот перехода можно наблюдать для $I = 1$, $\eta = 0$ (в отсутствии и в присутствии внешнего магнитного поля)?
9. Сколько частот перехода можно наблюдать для $I = 1$, $\eta \neq 0$ (в отсутствии и в присутствии внешнего магнитного поля)?
10. Сколько частот перехода можно наблюдать для $I = 3/2$, $\eta = 0$ (в отсутствии и в присутствии внешнего магнитного поля)?
11. Сколько частот перехода можно наблюдать для $I = 3/2$, $\eta \neq 0$ (в отсутствии и в присутствии внешнего магнитного поля)?
12. Каково условие 90-градусного импульса в ЯМР квадрупольных ядер?
13. Что такое спиновая температура? Можно ли квадрупольную систему охарактеризовать одной спиновой температурой?
14. Что означает «нагреть» или «охладить» спиновую систему?
15. Каков основной принцип двойных резонансов?
16. Что такое условие Хартмана-Хана? Его вид для двойных ЯМР-ЯМР резонансов.
17. Уравнение эволюции для матрицы плотности.
18. Что такое спиновая когерентность? Чем определяется её временная зависимость?
19. Порядок спиновой когерентности, регистрируемый спектрометром ЯМР, почему?
20. Вид тензора диполь-дипольного взаимодействия.
21. Чем отличается характер диполь-дипольного расщепления в ЯМР спектре для случая одинаковых и различных спинов? Какой случай следует считать промежуточным и как его надо рассматривать?

Примеры вопросов на экзамен

1. Что такое квадрупольные взаимодействия?
2. Что такое квадрупольное ядро? Назовите 3-4 квадрупольных ядра и их спины.
3. Что характеризует знак квадрупольного момента ядра?
4. Каков диапазон частот ЯМР?
5. Можно ли наблюдать ЯМР в отсутствии внешнего магнитного поля? Почему?
6. Что такое тензор градиента электрического поля (ГЭП)?
7. Что такое главная компонента и параметр асимметрии тензора ГЭП?
8. Сколько частот перехода можно наблюдать для $I = 1$, $\eta = 0$ (в отсутствии и в присутствии внешнего магнитного поля)?

9. Сколько частот перехода можно наблюдать для $I = 1$, $\eta \neq 0$ (в отсутствии и в присутствии внешнего магнитного поля)?
10. Сколько частот перехода можно наблюдать для $I = 3/2$, $\eta = 0$ (в отсутствии и в присутствии внешнего магнитного поля)?
11. Сколько частот перехода можно наблюдать для $I = 3/2$, $\eta \neq 0$ (в отсутствии и в присутствии внешнего магнитного поля)?
12. Уравнение эволюции для матрицы плотности.
13. Каково условие 90-градусного импульса в ЯМР квадрупольных ядер?
14. Что такое спиновая температура? Можно ли квадрупольную систему охарактеризовать одной спиновой температурой?
15. Что означает «нагреть» или «охладить» спиновую систему?
16. Каков основной принцип двойных резонансов?
17. Что такое условие Хартмана-Хана?
18. Что такое спиновая когерентность? Чем определяется её временная зависимость?
19. Порядок спиновой когерентности, регистрируемый спектрометром ЯМР, почему?
20. Вид тензора диполь-дипольного взаимодействия.
21. Чем отличается характер диполь-дипольного расщепления в ЯМР спектре для случая одинаковых и различных спинов? Какой случай следует считать промежуточным и как его надо рассматривать?

Пример экзаменационного билета

1. На практических занятиях было показано, что в случае двухчастотного облучения (на частотах Ω и ω) системы из двух диполь-дипольно взаимодействующих различных ядер I и S в магнитном поле \mathbf{B} эффективный спин-гамильтониан в дважды вращающейся системе координат дается выражением

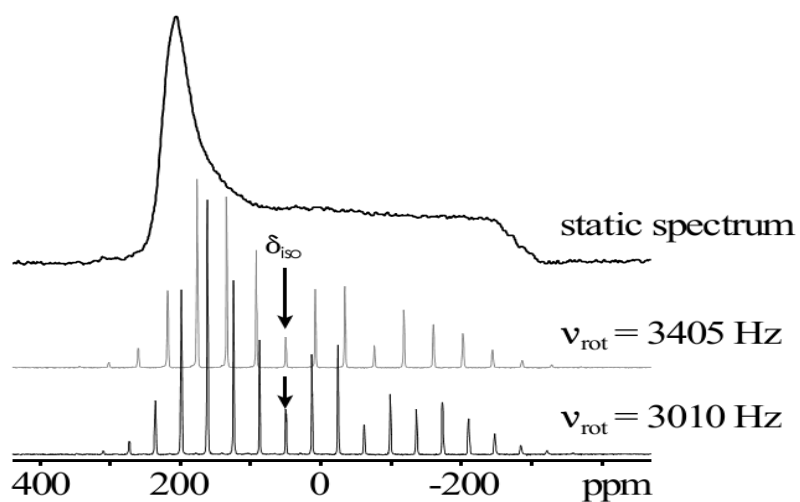
$$\begin{aligned} \hat{H}_{eff} = & -(\omega_I - \Omega)(\mathbf{nI}) - (\omega_S - \omega)(\mathbf{nS}) + \omega_I (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_I \cdot \mathbf{n})(\mathbf{nI}) + \omega_S (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_S \cdot \mathbf{n})(\mathbf{nS}) \\ & + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{nI})(\mathbf{nS}) - \Omega_1 (\boldsymbol{\tau}_\perp \mathbf{I}) - \omega_1 (\boldsymbol{\mu}_\perp \mathbf{S}) \end{aligned}$$

Для простоты считая, что $\Omega = \omega_I$, $\omega = \omega_S$, $\omega_1 = 0$, $\boldsymbol{\tau}_\perp = \mathbf{e}_x$, $\boldsymbol{\sigma}_I = \boldsymbol{\sigma}_S = 0$, то есть

$$\hat{H}_{eff} = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{nI})(\mathbf{nS}) - \Omega_1 I_x$$

объясните (*качественно*), почему, если $|\Omega_1| \gg \|\mathbf{D}\|$, то облучение системы на частоте магнитного резонанса распространенных ядер I приводит в спектре ЯМР ядер S к подавлению диполь-дипольного взаимодействия $S-I$. (на компетенцию ПК-1).

2. На рисунке показаны статические и MAS спектры ^{31}P ЯМР, записанные в поле 4.7 Т. Определить ^{31}P ЯМР параметры. К какому типу, Q^0 , Q^1 , Q^2 или Q^3 относится P центр?



(на компетенцию ПК-2).

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

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «ЯМР спектроскопия твёрдого тела»
по направлению подготовки 03.04.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

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