

**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**



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

Рабочая программа дисциплины

СПЕКТРОСКОПИЯ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

направление подготовки: **03.03.02 Физика**
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в период сессии) (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
7	108	32	32	32	4	4	2			2
Всего 108 часов / Зачетные единицы из них: - контактная работа 100 часов										
Компетенции ПК-2										

Ответственный за образовательную программу,
д.ф.-м.н., проф.

С.В. Цыбуля

Новосибирск, 2022

Содержание

Аннотация.....**Ошибка! Закладка не определена.**

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	3
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
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.	11
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	11
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.

Цель учебного курса «Спектроскопия магнитного резонанса» – дать набор необходимых сведений в области магнитного резонанса и научить его применению в исследованиях на молекулярном уровне структуры и физико-химических свойств химических и биологических субстанций, для практического использования в нанотехнологиях, материаловедении и медицине (магнитно-резонансная томография). В настоящее время магнитный резонанс превратился в мощный метод физического исследования структуры и свойств вещества, который используется в физике, химии, биологии, геофизике, медицине и других областях науки. Широкое развитие получили также практические приложения ядерного магнитного резонанса, самым значительным среди которых является медицинская магнитно-резонансная томография.

Материал лекционного курса увязывается с передовыми исследованиями всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов. Специально указываются темы, активно обсуждаемые в текущей профессиональной научной литературе. Все семинарские занятия проводятся в интерактивной форме. Во время семинарских занятий поощряется система соревнования. Существенным элементом образовательных технологий является не только умение студента найти решение поставленной задачи, но и донести его до всей аудитории. Умение сходу отвечать на вопросы сокурсников и преподавателя развивает профессиональные навыки, которые будут незаменимы в дальнейшей профессиональной деятельности.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующей профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-2 Способность использовать специализированные знания в области физики при решении научных и практических задач в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	<p>ПК -2.2. Применяет теоретические основы и базовые представления научного исследования в выбранной области фундаментальной и/или экспериментальной физики в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p> <p>ПК -2.3. Использует специализированные знания в области физики при выборе методов расчета, проведении статистического анализа экспериментальных данных в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>Знать основные принципы нерелятивистской квантовой механики и статистической физики, лежащие в основе описания явления магнитного резонанса.</p> <p>Уметь проводить оценки магнитно-резонансных параметров и времен релаксации.</p> <p>Владеть методами интерпретации спектров ЭПР и ЯМР.</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Спектроскопия магнитного резонанса» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.03.02 Физика. Общая и фундаментальная физика. Курс относится

к циклу специальных дисциплин кафедры химической и биологической физики. В нем рассматриваются основные принципы электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Особое внимание уделено физическим основам наблюдаемых в этих методах эффектов. Подробно рассмотрены современные варианты методов – импульсная ЭПР-спектроскопия, двумерный ЯМР, магнитно-резонансная томография и др. В результате прохождения курса у студентов должно сформироваться представление о том, какие современные спектроскопические методики применяются для исследования структуры и свойств, какие есть ограничения у этих методов. Необходимыми предпосылками для успешного освоения курса являются следующие. В цикле математических дисциплин: знание основ линейной алгебры, математического анализа, функционального анализа, методов математической физики и умение применять эти знания при решении задач. Необходимость владения указанными математическими дисциплинами обусловлена тем обстоятельством, что они составляют основу аппарата нерелятивистской квантовой механики, на которой основаны принципы магнитного резонанса. В цикле общефизических дисциплин необходимыми предпосылками являются знание и умение применять основные принципы классической электродинамики и термодинамики. Эти общефизические дисциплины входят составной частью в описание поведения во внешних магнитных полях как отдельных микрочастиц, так и макроскопически большого их количества.

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
7	108	32	32	32	4	4	2			2
Всего 108 часов / Зачетные единицы										
из них:										
- контактная работа 100 часов										
Компетенции ПК-2										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, лабораторные 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 трудоёмкость рабочей программы дисциплины составляет **108** академических часов / **3** зачетные единицы:

- занятия лекционного типа – 32 часа;
- практические занятия – 32 часа;
- лабораторные занятия – 32 часа;

- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 4 часа;
- самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации (подготовка к экзамену, консультации, экзамен) – 8 часов;

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (лекции, практические занятия, консультации, экзамен) составляет 100 часов.

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётные единицы, 108 академических часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы			Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Понятие магнитного резонанса. Магнитные моменты электрона и ядер. Уровни энергии спина в магнитном поле. Условия магнитного резонанса. Макроскопическая намагниченность. Кинетические уравнения для населенностей в двухуровневой системе. Время спин-решеточной релаксации. Насыщение резонанса.	1	6	2	2	2		
2	ЭПР в жидкости. Контактное взаимодействие. Уровни энергии радикала с одним ядром, правила отбора, спектр ЭПР. Спектр ЭПР для нескольких ядер. Точное решение спин-гамильтониана для атома водорода (формулы Брейта-Раби).	2	6	2	2	2		
3	ЯМР в жидкости. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие. Система A_nX_m . Отсутствие спин-спинового взаимодействия для эквивалентных спинов. Основные правила построения и расшифровки спектров ЯМР. Система АВ: уровни энергии, интенсивности и частоты переходов	3	6	2	2	2		

4.	Контактное СТВ в органических радикалах. С-Н фрагмент. Соотношение Мак-Коннела. Расчет спиновых плотностей на атомных орбиталях с помощью метода Хюккеля. Пример: бензильный радикал. СТВ с β -протонами, сверхсопряжение. Пример: циклогексаденильный 2радикал.	4	6	2	2	2		
5.	Спин-орбитальное взаимодействие и g-фактор в ЭПР. Поправки к гамильтониану в магнитном поле. Анизотропный g-фактор.	5	6	2	2	2		
6.	ЭПР радикалов в твердых телах. Влияние анизотропии g-фактора. Магнитное электрон-ядерное диполь-дипольное взаимодействие, анизотропное СТВ. Влияние анизотропии СТВ.	6	6	2	2	2		
7.	ЭПР ионов переходных металлов. d-орбитали. Ион Cu^{2+} в октаэдрическом комплексе с тетрагональным искажением. Потенциал кристаллического поля. Высокоспиновые и низкоспиновые комплексы.	7	6	2	2	2		
8.	Природа химического сдвига. Диамагнитный и парамагнитный вклады. Формулы Лэмба и Рамсея. Тензорный характер химсдвига. Кольцевые электронные токи в циклических системах. Измерение химсдвига.	8	6	2	2	2		
9.	Природа ядерных спин-спиновых взаимодействий. Взаимодействие ядерных спинов в молекуле. Спин-спиновые взаимодействия в органических соединениях.	9	6	2	2	2		
10.	ЯМР в твердых телах. Анизотропия химического сдвига. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие ядер. Уровни энергии и спектр ЯМР системы из двух неэквивалентных спинов. Форма спектра в полиориентированной системе. Вращение образца под магическим углом.	10	6	2	2	2		

11.	Уравнения Блоха. Движение макроскопического магнитного момента. Ларморова прецессия. Уравнения Блоха. Вращающаяся система координат. Эффективное поле. Классическое описание резонанса. Стационарное решение уравнений Блоха. Поглощаемая мощность. Сигналы поглощения и дисперсии. Лоренцева форма линии. Насыщение.	11	6	2	2	2		
12.	Форма линии и молекулярное движение. Эффекты обмена в спектрах магнитного резонанса. Модифицированные уравнения Блоха. Медленный и быстрый обмены.	12	6	2	2	2		
13.	Спиновая релаксация. Спин-решеточная релаксация в двухуровневой системе. Функция корреляции случайного процесса. Поперечная релаксация: векторная модель. Адиабатический и неадиабатический вклады. Однородная и неоднородная ширины линий.	13	6	2	2	2		
14.	Двойной резонанс. Электрон-ядерный эффект Оверхаузера. Двойной электрон-ядерный резонанс. Кросс-поляризация в ЯМР.	14	6	2	2	2		
15.	Свободная индукция и спиновое эхо. Угол поворота и условие полного возбуждения спектра. Спад свободной индукции. Спиновое эхо. Первичное и стимулированное эхо. Метод Карра-Парселла-Мейбум-Гилл. Измерение T_1 . Спиновое эхо в ЯМР системы АХ.	15	6	2	2	2		
16.	Импульсная Фурье-спектроскопия. Линейный отклик. Соответствие стационарных и Фурье-спектров. Выигрыш в чувствительности. Двумерная Фурье-спектроскопия и магнитно-резонансная томография. Двумерное разделение химических сдвигов и скалярных взаимодействий. Двумерная корреляционная спектроскопия (COSY). Изображение в ЯМР с помощью градиентов магнитного поля. Изображение на основе спада	16	6	2	2	2	4	

свободной индукции. Изображение с помощью спинового эха. Зависимость сигнала от РЧ-импульсов и частоты повторения. Изображение с помощью рефокусированного градиентом спинового эха.							
Групповая консультация		2					2
Самостоятельная подготовка обучающегося к экзамену		4					4
Экзамен		2					2
Всего		108	32	32	32	4	8

Программа и основное содержание лекций (32 часа)

1. Понятие магнитного резонанса. (2 часа)

Магнитные моменты электрона и ядер. Уровни энергии спина в магнитном поле. Условия магнитного резонанса. Макроскопическая намагниченность. Кинетические уравнения для населенностей в двухуровневой системе. Время спин-решеточной релаксации. Насыщение резонанса.

2. ЭПР в жидкости. Контактное взаимодействие. (2 часа)

Уровни энергии радикала с одним ядром, правила отбора, спектр ЭПР. Спектр ЭПР для нескольких ядер. Точное решение спин-гамильтониана для атома водорода (формулы Брейта-Раби).

3. ЯМР в жидкости. (2 часа)

Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие. Система A_nX_m . Отсутствие спин-спинового расщепления в спектре для эквивалентных спинов. Основные правила построения и расшифровки спектров ЯМР. Система АВ: уровни энергии, интенсивности и частоты переходов.

4. Контактное СТВ в органических радикалах. С-Н фрагмент. (2 часа)

Соотношение Мак-Коннела. Расчет спиновых плотностей на атомных орбиталях с помощью метода Хюккеля. Пример: бензильный радикал. СТВ с бета-протонами, сверхсопряжение. Пример: циклогексаденильный радикал.

5. Спин-орбитальное взаимодействие и g-фактор в ЭПР. (2 часа)

Поправки к гамильтониану в магнитном поле. Анизотропный g-фактор.

6. ЭПР радикалов в твердых телах. (2 часа)

Влияние анизотропии g-фактора. Форма линии ЭПР в полиориентированной системе. Магнитное электрон-ядерное диполь-дипольное взаимодействие, анизотропное СТВ. Влияние анизотропии СТВ.

7. ЭПР ионов переходных металлов. (2 часа)

d-орбитали. Ион Cu^{2+} в октаэдрическом комплексе с тетрагональным искажением. Потенциал кристаллического поля. Высокоспиновые и низкоспиновые комплексы.

8. Природа химического сдвига. (2 часа)

Диамагнитный и парамагнитный вклады. Формулы Лэмба и Рамсея. Тензорный характер химсдвига. Кольцевые электронные токи в циклических системах. Измерение химсдвига.

9. Природа ядерных спин-спиновых взаимодействий. (2 часа)

Взаимодействие ядерных спинов в молекуле. Спин-спиновые взаимодействия в органических соединениях.

10. ЯМР в твердых телах. (2 часа)

Анизотропия химического сдвига. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие ядер. Уровни энергии и спектр ЯМР системы из двух неэквивалентных спинов. Форма спектра в полиориентированной системе. Вращение образца под магическим углом.

11. Уравнения Блоха. (2 часа)

Движение макроскопического магнитного момента. Ларморова прецессия. Уравнения Блоха. Вращающаяся система координат. Эффективное поле. Классическое описание резонанса. Стационарное решение уравнений Блоха. Поглощаемая мощность. Сигналы поглощения и дисперсии. Лоренцева форма линии. Насыщение.

12. Форма линии и молекулярное движение. (2 часа)

Эффекты обмена в спектрах магнитного резонанса. Модифицированные уравнения Блоха. Медленный и быстрый обмены.

13. Спиновая релаксация. (2 часа)

Спин-решеточная релаксация в двухуровневой системе. Функция корреляции случайного процесса. Поперечная релаксация: векторная модель. Адиабатический и неадиабатический вклады. Однородная и неоднородная ширины линий.

14. Двойной резонанс. (2 часа)

Электрон-ядерный эффект Оверхаузера. Двойной электрон-ядерный резонанс. Кросс-поляризация в ЯМР.

15. Свободная индукция и спиновое эхо. (2 часа)

Угол поворота и условие полного возбуждения спектра. Спад свободной индукции. Спиновое эхо. Первичное и стимулированное эхо. Метод Карра-Парселла-Мейбум-Гилла. Измерение T₁. Спиновое эхо в ЯМР системы AX.

16. Импульсная Фурье-спектроскопия. (2 часа)

Линейный отклик. Соответствие стационарных и Фурье-спектров. Выигрыш в чувствительности. Двумерная Фурье-спектроскопия. Двумерное разделение химических сдвигов и скалярных взаимодействий. Двумерная корреляционная спектроскопия (COSY). Магнитно-резонансная томография. Изображение в ЯМР с помощью градиентов магнитного поля. Изображение на основе спада свободной индукции. Изображение с помощью спинового эха. Зависимость сигнала от РЧ-импульсов и частоты повторения. Изображение с помощью рефокусированного градиентом спинового эха. Изображение с помощью инверсии-восстановления.

Программа практических занятий (32 часа)

1. Уровни энергии спинов в магнитном поле. (2 часа)

Макроскопическая намагниченность для систем с произвольным спином.

2. Изотропные спектры ЭПР в жидкости. (2 часа)

Мультиплетная структура спектров ЭПР, правила построения и анализа спектров ЭПР.

3. Поправки второго порядка теории возмущений в спектрах ЭПР. (2 часа)

4. ЯМР в жидкости. (2 часа)

Влияние электроотрицательности заместителей на химические сдвиги. Типичные спин-спиновые взаимодействия в органических молекулах. Точное решение для двухспиновой системы и его дальнейший анализ в различных условиях, приводящий к пониманию магнитной эквивалентности ядер и номенклатуре ЯМР систем АВ и АХ. Условия наблюдаемости спин-спиновых взаимодействий.

5. Контактное СТВ в органических радикалах. (2 часа)

СН-фрагмент и сверхсопряжение. Расчет спиновых плотностей π -системы ряда сопряженных органических радикалов методом Хюккеля. Примеры анализа структур радикалов для применения метода Хюккеля и соотношения Мак-Коннела для расчета спектров ЭПР.

6. Расчет влияния кольцевых токов на спектры ЯМР полиароматических молекул (на примере нафталина). (2 часа)

7. Построение спектров ЯМР с использованием таблиц химических сдвигов и спин-спиновых взаимодействий в органических соединениях. Анализ реальных спектров ЯМР органических соединений в растворах. (4 часа)

8. Понятие о природе анизотропии тензоров g -фактора и СТВ. Вычисление анизотропного g -фактора p -электрона в кристаллическом поле. (4 часа)

9. Спиновая релаксация. (4 часа)

Оценка скорости электронной релаксации радикала в жидкости при известных значениях тензоров g -фактора и СТВ радикала в твердом состоянии.

10. Эффекты обмена в спектрах магнитного резонанса. (4 часа)

Вычисление условий обмена для моно- и бимолекулярных процессов. Вычисление трансформаций в спектрах ЭПР и ЯМР в условиях медленного и быстрого обмена.

11. Двухчастотные методы в магнитном резонансе: ENDOR, INDOR, эффект Оверхаузера. (4 часа)

12. Свободная индукция, спиновое эхо и Фурье-спектроскопия. (4 часа)

Влияние химических процессов на вид спектров в условиях импульсной регистрации (на примере мономолекулярной реакции с обратной константой скорости, сравнимой по величине со временем релаксации спинов).

Самостоятельная работа студентов (8 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	4
Подготовка к экзамену	4

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература

1. Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса. Новосибирск: Изд-во НГУ, 2010.
2. Керрингтон А., Мак-Лачлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.

5.2. Дополнительная литература

1. Салихов К. М., Семенов А. Г., Цветков Ю. Д. Электронное спиновое эхо и его применение. Новосибирск: Наука, 1976.
2. Бакс Э. Двумерный ядерный магнитный резонанс в жидкости. Новосибирск: Наука, 1989.

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса. Новосибирск: Изд-во НГУ, 2010.
2. Бакс Э. Двумерный ядерный магнитный резонанс в жидкости. Новосибирск: Наука, 1989.
3. Керрингтон А., Мак-Лачлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.

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.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется

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

Для реализации дисциплины История 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;

3. Лаборатории;

4. Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования.

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 по оценочной системе в виде заданий для самостоятельного решения, контрольных работ. 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 две контрольные работы, проводимые в течение семестра, а также количество сданных задач из заданий для самостоятельного решения.

Две промежуточные письменные контрольные работы проводятся в течение семестра по отдельному расписанию. В каждой контрольной студенту необходимо ответить на 5 предложенных вопросов. При проведении контрольной работы пользоваться источниками информации запрещается.

Сдача задания происходит в форме беседы с преподавателем в специально отведенное время (прием заданий), сдать задачи необходимо не позднее 30 декабря. Неспособность студента ответить на технические вопросы по представленному решению считается попыткой сдать списанную задачу. В этом случае прием задачи откладывается до следующего приема заданий. За работу в семестре выставляется оценка «неудовлетворительно» в случае, если сдано менее 70% задач из заданий.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-2 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области Спектроскопии магнитного резонанса в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене с учетом результатов текущего контроля успеваемости. Итоговая оценка не может превышать оценку

за итоговую письменную контрольную работу более, чем на 1 балл, и не может быть выше “3” («удовлетворительно»), если оценка за работу в семестре “2” («неудовлетворительно»).

Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию, по билетам, в устной форме. Билет состоит из пяти вопросов. Уровень сформированности компетенций оценивается преподавателем по пятибалльной шкале с учётом критериев (таблица 2) по результатам ответов на вопросы билета и на дополнительные уточняющие вопросы.

Оценка «неудовлетворительно» - уровень усвоения компетенций не сформирован.

Для получения оценки «удовлетворительно» (пороговый уровень освоения компетенций) необходимо продемонстрировать минимально необходимые базовые знания предмета и ответить хотя бы на три вопроса билета.

Для получения оценки «хорошо» (базовый уровень освоения компетенций) нужно ответить на четыре вопроса билета, допускается несколько несущественных ошибок, ответить на дополнительные вопросы.

Для получения оценки «отлично» (продвинутый уровень освоения компетенций) необходимо развёрнуто ответить на все пять вопросов из билета, аргументированно ответить на дополнительные вопросы.

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.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК -2.2. Применяет теоретические основы и базовые представления научного исследования в выбранной области фундаментальной и/или экспериментальной физики в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Знать основные принципы нерелятивистской квантовой механики и статистической физики, лежащие в основе описания явления магнитного резонанса.	Проведение контрольных работ, экзамен.
ПК-2.3. Использует специализированные знания в области физики при выборе методов расчета, проведении статистического анализа экспериментальных данных в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Уметь проводить оценки магниторезонансных параметров и времен релаксации. Владеть методами интерпретации спектров ЭПР и ЯМР..	Проведение контрольных работ, экзамен.

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Спектроскопия магнитного резонанса».

Таблица 10.2

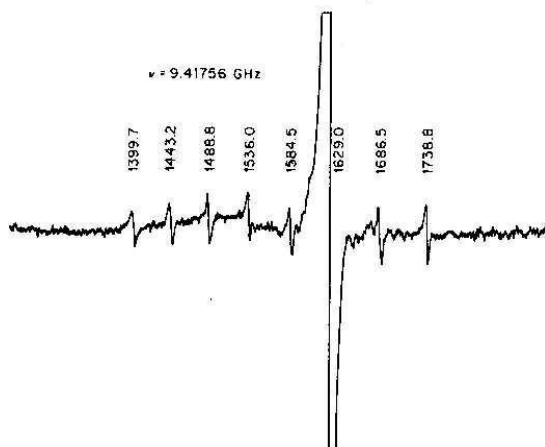
Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 2.2	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 2.3	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 2.3	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

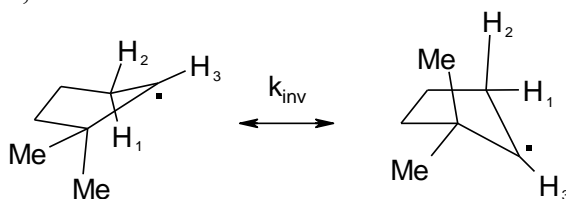
Примеры некоторых типовых заданий для самостоятельного решения для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся.

- Схематически изобразите ожидаемый спектр ЯМР первого порядка для каждой из следующих систем:
 - AX_3 ;
 - A_2X_2 ;
 - A_3X_3 ;
 - A_2X_4 .
- В двухядерной системе (оба спина ядер равны $1/2$) резонансные частоты равны ω_1 и ω_2 , соответственно и энергия взаимодействия спинов J . Найдите энергии системы для следующих отношений δ/J : 0.1; 0.5; 1.0; 2.0 и 10.0, где $\delta = \omega_1 - \omega_2$. Схематически изобразите спектры ЯМР для каждого случая, указав вычисленные интенсивности переходов.

- Изобразите схематически друг над другом протонные спектры ЯМР соединений C_2H_5F , C_2H_5Cl , C_2H_5Br , C_2H_5OH , $C_2H_5NH_2$. Объясните изменение в положении резонанса CH_2 (метиленовых) и CH_3 (метильных) протонов.
- Экспериментальные значения констант СТВ в изо-пропильном ($CH_3CH\bullet CH_3$) радикале: H: 2.194 мТ и ^{13}C : 11.36 мТ для CH фрагмента; H: 2.469 мТ и ^{13}C : 4.67 мТ для CH_3 - групп. Оцените спиновые плотности на всех атомах в радикале. Какая спиновая плотность должна быть для радикала в целом?
- На рисунке представлен спектр ЭПР Fe^+ и Co^{2+} в MgO при 4.2 °К. В рамках теории возмущений второго порядка рассчитать изотропный спектр ЭПР иона Co^{2+} (электронная конфигурация $3d^7$, $g_{iso} = 4.280$, $A_{iso} = 290.55$ МГц, $S = 1/2$, $I_{Co} = 7/2$, $\gamma_{Co} = 0.63 \cdot 10^4 \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{G}^{-1}$). Оценить насколько хорошо рассчитанный спектр соответствует экспериментальному. Найти g-фактор Fe^+ , используя экспериментальное значение частоты и величин магнитного поля переходов представленные на рисунке.



- В рамках метода Хюккеля рассчитать спектры ЭПР пентадиенильного радикала ($CH_2=CH-CH=CH-CH_2\bullet$) и анион-радикала акролеина ($O=CH-CH=CH_2$). В последнем случае кулоновские (α) и резонансные (β) интегралы для кислорода принять равными $\alpha_O = \alpha_C$ и $\beta_{CO} = 1.2 \cdot \beta_{CC}$.
- 2,2-диметилциклопентильный радикал имеет две инверсные конформации. Константы СТВ протона в 3 положении 1.5 мТ, а протонов CH_2 группы 2.0 и 1.0 мТ в экваториальном и аксиальном положении, соответственно.



Нарисовать спектр ЭПР данного радикала а) в отсутствии инверсии; б) при медленной инверсии ($K_{inv} \ll \text{СТВ}$); в) при быстрой инверсии ($K_{inv} \gg \text{СТВ}$). Для последнего случая оценить энергию активации инверсии кольца 2,2-диметилциклопентильного радикала, если ширина обменно-суженных компонент спектра при $T = 250\text{K}$ равна 0.25 мТ; при 300K – 0.15 мТ, а крайних компонент спектра 0.02 мТ при обеих температурах.

- На рисунке приведен спектр ENDOR иона Co^{2+} в MgO при 4.2°К. Частоты переходов приведены для центров первой производной. Регистрация по ЭПР переходу $\Delta M_s = \pm 1$, $M_I = +1/2$ в поле 1561 гаусс и частоте 9.563 ГГц, $g = 4.280$.
 б) Объясните, почему в спектре ENDOR наблюдается 4 линии;



- с) используя результаты расчетов уровней энергии во втором порядке теории возмущения из задачи 5 определите экспериментальную изотропную константу СТВ.

Примерные вопросы на экзамен

1. Уровни энергии радикала с одним ядром, правила отбора, спектр ЭПР.
2. Кольцевые электронные токи в циклических системах.
3. Вращающаяся система координат, эффективное поле. классическое описание резонанса.
4. Поперечная релаксация: векторная модель.
5. Изображение в МРТ на основе спада свободной индукции.

Пример экзаменационного билета

МИНОБРНАУКИ РОССИИ Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ) Физический факультет
ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____
<ol style="list-style-type: none"> 1. Уровни энергии радикала с одним ядром, правила отбора, спектр ЭПР (на компетенцию ПК-1). 2. Кольцевые электронные токи в циклических системах (на компетенцию ПК-1). 3. Вращающаяся система координат, эффективное поле. классическое описание резонанса (на компетенцию ПК-2). 4. Поперечная релаксация: векторная модель (на компетенцию ПК-2). 5. Изображение в МРТ на основе спада свободной индукции (на компетенцию ПК-2).
Составитель _____ / Дзюба С.А. / <div style="text-align: center; margin-left: 100px;">(подпись)</div>
« ____ » _____ 20 ____ г.

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 «Спектроскопия магнитного резонанса»
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