

**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**

академик РАН



УТВЕРЖДАЮ
Декан ФФ
А. Е. Бондарь
« 04 » 10 2020 г.

Рабочая программа дисциплины

СПИНОВАЯ ДИНАМИКА

направление подготовки: **03.04.02 Физика, Курс 1, семестр 1**
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
1	72	32			18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Разработчик:
д.ф.-м.н.

 К.Л. Иванов

Зав. кафедрой ХиБФ ФФ НГУ
д.ф.-м.н., проф.

 С. А. Дзюба

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

 И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2020

Содержание	
Аннотация	3
1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	5
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	5
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.	6
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	6
5. Перечень учебной литературы.	13
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	13
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	13
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	14
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	14
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	14

Аннотация

к рабочей программе дисциплины «Спиновая динамика»

Направление: **03.04.02 Физика**

Направленность (профиль): Общая и фундаментальная физика

Программа дисциплины «Спиновая динамика» составлена в соответствии с требованиями СУОС к уровню магистратуры по направлению подготовки **03.04.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная 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 первого курса магистратуры физического факультета в осеннем семестре.

Цель курса – знакомство с базовыми понятиями и теориями, широко применяемыми при описании явлений в современной спектроскопии магнитного резонанса.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующих профессиональных компетенций:

ПК-1 способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта

ПК-2 способность свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **Знать:** формализм матрицы плотности: основы статистического описания квантовых систем, операторный формализм в теории матрицы плотности, уравнение Лиувилля – фон Неймана, основные методы решения данного уравнения. Знать методы описания эффектов спиновой релаксации. Знать принципы импульсной спектроскопии магнитного резонанса в одном, двух и трех измерениях; основные последовательности импульсной спектроскопии магнитного резонанса и методы аналитического и численного решения уравнения Лиувилля – фон Неймана для матрицы плотности; ориентироваться в соответствующей области научной литературы.
- **Уметь:** решать уравнение Лиувилля – фон Неймана в типичных для ЯМР ситуациях; проводить расчеты спиновой динамики в импульсных экспериментах по магнитному резонансу; описывать эффекты спиновой релаксации.
- **Владеть:** основными теоретическими методами и понятиями современной спектроскопии ЯМР: формализм матрицы плотности, операторный формализм, теория релаксации Рэдфилда, теория среднего гамильтониана, теория Флоке; навыками постановки и решения научных задач методами импульсной спектроскопии магнитного резонанса: операторный формализм, теория Рэдфилда, теория среднего гамильтониана, теория Флоке.

Курс рассчитан на один семестр (1-й). Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, 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.

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

Цель учебного курса «Спиновая динамика» – предоставление набора необходимых сведений в области подходов и методов, применяемых в современной спектроскопии магнитного резонанса, обучение слушателей основам базовых теорий и моделей спиновой динамики, их применению для описания воздействия различных импульсных последовательностей ЯМР на системы ядерных спинов, а также получение слушателями практических навыков использования полученных знаний в области спектроскопии ЯМР.

Профессиональная компетенция ПК-1 - способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики (*в части задач спиновой динамики*) и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

Профессиональная компетенция ПК-2 - способность свободно владеть разделами физики (*в части разделов спиновой динамики*), необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.

Материал лекционного курса увязывается с передовыми исследованиями всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов. Специально указываются темы, активно обсуждающиеся в текущей профессиональной научной литературе.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **Знать:** формализм матрицы плотности: основы статистического описания квантовых систем, операторный формализм в теории матрицы плотности, уравнение Лиувилля – фон Неймана, основные методы решения данного уравнения. Знать методы описания эффектов спиновой релаксации. Знать принципы импульсной спектроскопии магнитного резонанса в одном, двух и трех измерениях (ПК-1.1); основные последовательности импульсной спектроскопии магнитного резонанса и методы аналитического и численного решения уравнения Лиувилля – фон Неймана для матрицы плотности; ориентироваться в соответствующей области научной литературы (ПК-2.1).
- **Уметь:** решать уравнение Лиувилля – фон Неймана в типичных для ЯМР ситуациях (ПК-1.2); делать расчеты спиновой динамики в импульсных экспериментах по магнитному резонансу; описывать эффекты спиновой релаксации (ПК-2.2).
- **Владеть:** основными теоретическими методами и понятиями современной спектроскопии ЯМР: формализм матрицы плотности, операторный формализм, теория релаксации Рэдфилда, теория среднего гамильтониана, теория Флоке (ПК-1.3); навыками постановки и решения научных задач методами импульсной спектроскопии магнитного резонанса: операторный формализм, теория Рэдфилда, теория среднего гамильтониана, теория Флоке (ПК-2.3).

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Спиновая динамика» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.04.02 Физика, общая и фундаментальная физика. Курс относится к числу специальных дисциплин по выбору, реализуемых кафедрой химической и биологической физики. В нем рассматриваются описание спиновой динамики в терминах матрицы плотности, методы решения уравнения, описывающих ее временную эволюцию, принципы магнитного резонанса в одном,

двух и трех измерениях и применение импульсных последовательностей ЯМР, позволяющих получить информацию о структуре и динамике молекул. Особое внимание уделено физическим идеям и принципам импульсной спектроскопии магнитного резонанса, и способам ее реализации на практике. В результате прохождения курса у студентов кафедры физического факультета должно сформироваться представление о том, каким образом импульсные последовательности воздействуют на спиновые системы, какие экспериментальные методы используются для решения тех или иных задач спектроскопии ЯМР, каковы ограничения этих методов. Эти знания необходимы исследователю в области химической и биологической физики как для решения задач, связанных с определением структуры и динамики молекул, 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, линейной алгебры и методов математической физики.
- В цикле общезначимых дисциплин необходимыми предпосылками являются знание и умение применять основные принципы квантовой механики, молекулярной и статистической физики.

3. Трудоемкость дисциплины в зачетных 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
1	72	32			18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, 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.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного 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 трудоёмкость (в часах)					Консультации перед экзаменом (часов)	Промежуточная аттестация (в период сессии) (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	Сам. работа во время промежу точной аттестаци и		
				Лек- ции	Прак- тиче- ские заня- тия				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.	Основные понятия магнитного резонанса (кратко) Спиновый магнетизм. Прецессия магнитного момента. Явление магнитного резонанса. Уравнения Блоха. Гипотеза спинового гамильтониана.	1	4	2		2			
2	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	4-5	6	4		2			

	<p>Лиувилля-фон Неймана. Решение уравнения Лиувилля-фон Неймана и расчет оператора эволюции. Прецессия спиновой намагниченности и явление магнитного резонанса на языке матрицы плотности.</p>								
3	<p>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.</p>	6	4	2		2			
4.	<p>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</p>	7-8	6	4		2			

	операторов: свободная прецессия и спин-спиновое взаимодействие. Последовательности INEPT и INADEQUATE.								
5.	Магнитный резонанс в двух и трех измерениях Основные принципы ЯМР в двух измерениях. Двумерное преобразование Фурье и вид двумерных спектров. Описание экспериментов по ЯМР в двух измерениях в рамках операторного формализма. Расчет вида спектров COSY, TOCSY, HSQC/HMQC. Магнитный резонанс в трех измерениях: общие принципы и примеры (двухчастотные и трехчастотные методы). Методы переноса поляризации и последовательного отнесения сигналов.	9	4	2		2			
6.	Общая теория релаксации в	10	2	2					

	<p>рамках формализма матрицы плотности Флуктуации и релаксация, механизмы релаксации. Теория Рэдфилда. Супероператор релаксации. Описание T_1- и T_2- релаксации в двухуровневой системе под действием локальных полей в рамках формализма матрицы плотности.</p>								
7.	<p>Дипольная релаксация Дипольная релаксация в рамках формализма матрицы плотности. Кросс-релаксация: эффект Оверхаузера и ядерный эффект Оверхаузера (NOE). Кросс-коррелированная релаксация. Двумерные ЯМР эксперименты: NOESY/EXSY/R OESY, TROSY.</p>	11	4	2		2			
8.	<p>Теория среднего гамильтониана Оператор эволюции для зависящего от времени спин-гамильтониана. Вычисление среднего</p>	14-15	4	4					

	гамильтониана. Средний гамильтониан для случая гамильтониана, периодически меняющегося во времени. Средний гамильтониан в представлении взаимодействия. Примеры: сравнение импульсных последовательностей СР и СРМГ. Композитные импульсы.								
9.	Теория Флоке Формулировка задачи и ее общее решение для периодически изменяющегося во времени гамильтониана. Представления Фурье и Флоке для гамильтониана и матрицы плотности. Диагонализация гамильтониана Флоке. Одноквантовый резонанс, сдвиг Блоха-Зигерта. Многоквантовые резонансы.	16	2	2					
	Групповая консультация		2					2	
	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		18				18		
	Экзамен		4					2	2
Всего			72	32		18	18	2	2

Программа и основное содержание лекций (32 часа)

I. Основные понятия магнитного резонанса (кратко)

Спиновый магнетизм. Прецессия магнитного момента. Явление магнитного резонанса. Уравнения Блоха. Гипотеза спинового гамильтониана. (2 часа)

II. Формализм матрицы плотности в магнитном резонансе

1. Основы квантово-статистического описания (4 часа)

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.

2. Базовые эксперименты в магнитном резонансе в рамках формализма матрицы плотности (2 часа)

Одноимпульсный эксперимент в магнитном резонансе. Квадратурное детектирование сигнала. Фаза сигнала и фазовые циклы. Спиновое эхо. Спин-локинг.

3. Операторный формализм в магнитном резонансе (4 часа)

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. Последовательности INEPT и INADEQUATE.

III. Магнитный резонанс в двух и трех измерениях

Основные принципы ЯМР в двух измерениях. Двумерное преобразование Фурье и вид двумерных спектров. Описание экспериментов по ЯМР в двух измерениях в рамках операторного формализма. Расчет вида спектров COSY, TOCSY, HSQC/HMQC. Магнитный резонанс в трех измерениях: общие принципы и примеры (двухчастотные и трехчастотные методы). Методы переноса поляризации и последовательного отнесения сигналов. (2 часа)

IV. Спиновая релаксация

1. Общая теория релаксации в рамках формализма матрицы плотности (2 часа)

Флуктуации и релаксация, механизмы релаксации. Теория Рэдфилда. Супероператор релаксации. Описание T_1 - и T_2 - релаксации в двухуровневой системе под действием локальных полей в рамках формализма матрицы плотности.

2. Дипольная релаксация (2 часа)

Дипольная релаксация в рамках формализма матрицы плотности. Кросс-релаксация: эффект Оверхаузера и ядерный эффект Оверхаузера (NOE). Кросс-коррелированная релаксация. Двумерные ЯМР эксперименты: NOESY/EXSY/ROESY, TROSY.

V. Спиновая динамика под действием зависящего от времени гамильтониана

1. Теория среднего гамильтониана (4 часа)

Оператор эволюции для зависящего от времени спин-гамильтониана. Вычисление среднего гамильтониана. Средний гамильтониан в представлении взаимодействия. Примеры: сравнение импульсных последовательностей CP и CPMG. Композитные импульсы.

2. Теория Флоке (2 часа)

Формулировка задачи и ее общее решение для периодически изменяющегося во времени гамильтониана. Представления Фурье и Флоке для гамильтониана и матрицы плотности. Диагонализация гамильтониана Флоке. Одноквантовый резонанс, сдвиг Блоха-Зигерта. Многоквантовые резонансы.

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Выполнение домашнего задания (задач для самостоятельного решения)	18
Подготовка к экзамену.	18

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература

1. Дзюба С. А., «Основы магнитного резонанса: учебное пособие» Новосибирск: НГУ, 2010.

5.2. Дополнительная литература

2. Эрнст Р. Р., Боденхаузен Д., Вокаун А., «ЯМР в одном и двух измерениях», М.: Мир, 1990.
3. Абрагам А., «Ядерный магнетизм», М.: Издательство иностранной литературы, 1984.

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Эрнст Р. Р., Боденхаузен Д., Вокаун А., «ЯМР в одном и двух измерениях», М.: Мир, 1990.

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 Спиновая динамика 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 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 виде контроля решения задач для самостоятельного решения. Оценка знаний, умений, навыков и освоения компетенций обучающимися в рамках текущего контроля может проводиться согласно шкале и критериям, представленным ниже.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленные компетенции ПК-1 и ПК-2 сформированы не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области Спиновой динамики 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. 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 для самостоятельного решения 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.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Спиновая динамика».

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 ПК 2.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. 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 ПК 2.2	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 1.3 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.
-----------------------------------	------------------	--	--	--	---

Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

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

1. Рассмотрите случай спина, поляризованного вдоль оси z и имеющего отстройку от частоты РЧ-импульса, и рассчитайте траекторию намагниченности под действием РЧ-импульса с отстройкой частоты от резонанса, равной $\Delta\Omega/2\pi = 10$ кГц, амплитудой $\gamma B_1/2\pi = 10$ кГц и длительностью 25 мкс. Сравните результат со случаем $\Delta\Omega = 0$ и определите возможные изменения (амплитуда и фаза сигнала) в виде одномерного спектра.
2. Определите угол поворота намагниченности и фазу импульса, обеспечивающего оптимальную конверсию спинового порядка для случаев: $I_{1x} \rightarrow -I_{1x}$, $2I_{1y}I_{2z} \rightarrow -2I_{1z}I_{2y}$, $2I_yS_z \rightarrow 2I_yS_x$, $4I_{1x}I_{2x}I_{3z} \rightarrow 4I_{1z}I_{2z}I_{3x}$, $I_{1+}I_{2z} \rightarrow I_{1-}I_{2z}$.
3. Определите операторы, соответствующие гомоядерной антифазной когерентности, продольной намагниченности, поперечной намагниченности, гомоядерной двухквантовой когерентности, гетероядерному двухспиновому порядку.
4. Какие вклады в матрицу плотности (какие операторы) генерируются в двухспиновой системе I_1I_2 при воздействии на первый спин при помощи импульсных последовательностей $90_y - \Delta - 180_y - \Delta - 90_y$, $90_y - \Delta - 180_y - \Delta - 90_x$, если $\Delta = 1/4J$?
5. Спин $1/2$ находится в состоянии $|\alpha\rangle$ и подвергается воздействию импульсов $90_{90}180_{225}$. Определите конечное состояние спина, покажите, что оно является собственным для оператора \hat{I}_y и определите собственное значение. Установите траекторию движения вектора спина в ходе приложения импульсов.
6. Каким простым вращениям соответствуют составные импульсы $90_y270_x90_y$ и $90_{135}270_{45}90_{135}$?
7. Для системы со спином 2 определите возможные типы многоквантовых переходов между состояниями $|-1\rangle$ и $|+1\rangle$.

Вопросы на экзамен

На проверку сформированности компетенции ПК-1:

1. Описание ансамблей спинов: от волновой функции к матрице плотности. Свойства матрицы плотности. Чистые и смешанные состояния, примеры.
2. 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.
3. Одноимпульсный эксперимент в магнитном резонансе. Квадратурное детектирование сигнала. Фаза сигнала и фазовые циклы. Спиновое эхо. Спин-локинг.
4. Матрица плотности системы спинов $1/2$. Операторный формализм. Населенности состояний и когерентности, порядок когерентности. Путь переноса когерентности.
5. Эволюция различных операторов: свободная прецессия и спин-спиновое взаимодействие. Последовательности INEPT и INADEQUATE.

6. Двумерное преобразование Фурье и вид двумерных спектров магнитного резонанса (описание в рамках операторного формализма). Примеры последовательностей ЯМР в двух измерениях: COSY, HSQC.
7. Флуктуации и релаксация, механизмы релаксации. Теория Рэдфилда.
На проверку сформированности компетенции ПК-2:
8. T₁- и T₂- релаксация в двухуровневой системе под действием локальных полей (описание в рамках формализма матрицы плотности).
9. Дипольная релаксация. Кросс-релаксация: эффект Оверхаузера и ядерный эффект Оверхаузера (NOE). Кросс-коррелированная релаксация.
10. Двумерные ЯМР эксперименты NOESY/EXSY/ROESY, TROSY.
11. Вычисление среднего гамильтониана. Средний гамильтониан в представлении взаимодействия.
12. Применение теории среднего гамильтониана: сравнение импульсных последовательностей CP и CPMG.
13. Композитные импульсы.
14. Представления Фурье и Флоке для гамильтониана и матрицы плотности. Диагонализация гамильтониана Флоке. Одноквантовый резонанс, сдвиг Блоха-Зигерта. Многоквантовые резонансы.

Пример экзаменационного билета

<p style="color: #0070C0; margin: 0;">МИНОБРНАУКИ РОССИИ</p> <p style="margin: 0;">Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)</p> <p style="margin: 0;">Физический факультет</p>
<p>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Эволюция матрицы плотности: уравнение Лиувилля-фон Неймана. Решение уравнения Лиувилля-фон Неймана и расчет оператора эволюции (на компетенцию ПК-1). 2. Вычисление среднего гамильтониана. Средний гамильтониан в представлении взаимодействия (на компетенцию ПК-2). <p>Составитель _____ / Иванов К.Л. / (подпись)</p> <p>« ____ » _____ 20 ____ г.</p>

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 фонда оценочных средств
по дисциплине «Спиновая динамика»
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