

**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

« 29 » 2020 г.

**Рабочая программа дисциплины**

**СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ЭПР СПЕКТРОСКОПИИ**

направление подготовки: **03.04.02 Физика, Курс 2, семестр 4**  
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
4	72	32			18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Разработчик:  
к.ф.-м.н.

 О.А. Крумкачёва

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

<b>Аннотация</b> .....	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
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся. ....	12
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	12
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. ....	13

## Аннотация

к рабочей программе дисциплины «Современные методы ЭПР спектроскопии»

Направление: **03.04.02 Физика**

**Направленность (профиль): Общая и фундаментальная физика**

Программа дисциплины «Современные методы ЭПР спектроскопии» 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 второго курса магистратуры физического факультета в весеннем семестре.

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

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:** основные приближения, уравнения и основные методы стационарной и импульсной ЭПР спектроскопии; существующие программные пакеты для численных расчетов и обработки ЭПР спектров.
- **Уметь:** определять наиболее подходящий экспериментальный метод ЭПР для исследования конкретной системы; определять различные физико-химические параметры на основе экспериментальных данных ЭПР.
- **Владеть:** основными понятиями ЭПР спектроскопии; навыками постановки и решения научных задач методами импульсной ЭПР спектроскопии, в том числе в высоких магнитных полях, методами модуляции электронного спинового эха (ESEEM, HYSCORE), методами импульсного двойного электрон-ядерного резонанса (ENDOR), в том числе с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR), методами детектирования сигнала ЯМР на основе импульсного двойного электронного резонанса (ELDOR-detected NMR), одночастотными и двухчастотными методами дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, SIFTER, 2+1, DQC, RIDME, RE), методами ЭПР на основе импульсов произвольной формы, методами оптического и электрического детектирования ЭПР, методом детектирование ЭПР отдельных молекул, методами ЭПР томографии и спиновых зондов.

Курс рассчитан на один семестр (4-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 «Современные методы ЭПР спектроскопии» – обучение слушателей основам базовых теорий и моделей современных методов ЭПР спектроскопии, их применению для определения различных физико-химических свойств веществ, а также получение слушателями практических навыков использования полученных знаний в области химической физики и биофизики.

Профессиональная компетенция ПК-1 - способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики (*в части задач современных методов ЭПР спектроскопии*) 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 современных методов ЭПР спектроскопии*), 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:** основные приближения, уравнения и основные методы стационарной и импульсной ЭПР спектроскопии (ПК-1.1); существующие программные пакеты для численных расчетов и обработки ЭПР спектров (ПК-2.1).
- **Уметь:** определять наиболее подходящий экспериментальный метод ЭПР для исследования конкретной системы (ПК-1.2); определять различные физико-химические параметры на основе экспериментальных данных ЭПР (ПК-2.2).
- **Владеть:** основными понятиями ЭПР спектроскопии (ПК-1.3); навыками постановки и решения научных задач методами импульсной ЭПР спектроскопии, в том числе в высоких магнитных полях, методами модуляции электронного спинового эха (ESEEM, HYSCORE), методами импульсного двойного электрон-ядерного резонанса (ENDOR), в том числе с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR), методами детектирования сигнала ЯМР на основе импульсного двойного электронного резонанса (ELDOR-detected NMR), одночастотными и двухчастотными методами дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, SIFTER, 2+1, DQC, RIDME, RE), методами ЭПР на основе импульсов произвольной формы, методами оптического и электрического детектирования ЭПР, методом детектирование ЭПР отдельных молекул, методами ЭПР томографии и спиновых зондов (ПК-2.3).

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Современные методы ЭПР спектроскопии» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.04.02 Физика, общая и фундаментальная физика. Курс относится к числу специальных дисциплин, реализуемых кафедрой химической и биологической физики. В нем рассматриваются теоретические основы и экспериментальные методы ЭПР спектроскопии,

позволяющие получить информацию о различных физико-химических свойствах веществ. Особое внимание уделено физическим идеям и принципам, лежащим в основе этих методов и способам их реализации на практике. В результате прохождения курса у студентов кафедры должно сформироваться представление о том, какие экспериментальные методы используются для решения тех или иных задач химической физики и биофизики, какие есть ограничения у этих методов. Эти знания необходимы исследователю в области химической и биологической физики, как для решения задач, так и для понимания научной литературы (статей) в этой области. Необходимыми предпосылками для успешного освоения курса являются следующие:

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

### 3. Трудоемкость 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
4	72	32			18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1, 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

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 отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачётные 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.	Введение. Спиновый гамильтониан. Основные взаимодействия в ЭПР. Резонансное поглощение. Спектры ЭПР в жидкости и в твердом теле.	1	2	2					
2	Релаксация электронных спинов в твердом веществе и в замороженных растворах. Ключевые механизмы и температурные зависимости релаксации.	2	4	2		2			
3	Основные типы ЭПР экспериментов (стационарный и импульсный ЭПР) и модели их описания.	3	4	2		2			
4.	Принцип работы и элементы современных ЭПР спектрометров.	4	4	2		2			
5.	Матрица плотности. Уравнение	5	4	2		2			

	Лиувилля - фон Неймана. Формализм спиновых операторов.								
6.	Эффекты ядерной модуляции электронного спинового эха. Описание 2-х и 3-х импульсной последовательности ESEEM. Методы HUSCORE. Оптимизация методов ESEEM.	6	4	2		2			
7.	Импульсный двойной электрон-ядерный резонанс (ENDOR). Эксперименты с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR). Методы TRIPLE и ELDOR-detected NMR.	7	4	2		2			
8.	Основы дипольной ЭПР спектроскопии. Обменное и диполь-дипольное взаимодействия. Измерение межспиновых расстояний методами стационарного ЭПР.	8	2	2					
9.	Одночастотные и двухчастотные методы импульсной дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR,	9	4	2		2			



	SIFTER, 2+1, DQC, RIDME, RE).								
10.	Различные типы спиновых меток, их спектроскопические свойства и особенности применения. Ориентационная селективность. Ортогональные метки. Особенности для систем с 3 и более метками. Методы обработки данных дипольного ЭПР. Достоверность получаемых функций распределения по расстояниям.	10	4	2		2			
11.	Импульсы произвольной формы. Оптимизация импульсных последовательностей. Теория оптимального управления спиновыми системами в ЭПР.	11	4	2		2			
12.	Особенности ЭПР ионов переходных и редкоземельных металлов. ЭПР в обменно-связанных системах. ЭПР в проводящих системах.	12	2	2					
13.	Стационарный и импульсный ЭПР в высоких	13	2	2					

	магнитных полях. Чувствительность и разрешение. Релаксация в высоких полях.								
14.	Альтернативные схемы регистрации ЭПР. Оптическое детектирование. Детектирование ЭПР отдельных молекул. Электрическое детектирование в ЭПР.	14	2	2					
15.	Методы численных расчетов ЭПР спектров и ЭПР экспериментов.	15	2	2					
16.	Основы ЭПР томографии. Спиновые зонды. Примеры применения в биологии и медицине.	16	2	2					
17.	Групповая консультация	17	2					2	
18.	Самостоятельная работа в период подготовки к промежуточной аттестации		18				18		
19.	Экзамен		2						2
<b>Всего</b>			<b>72</b>	<b>32</b>		<b>18</b>	<b>18</b>	<b>2</b>	<b>2</b>

### Программа и основное содержание лекций (32 часа)

1. Введение. Спиновый гамильтониан. Основные взаимодействия в ЭПР. Резонансное поглощение. Спектры ЭПР в жидкости и в твердом теле. (2 часа)
2. Релаксация электронных спинов в твердом веществе и в замороженных растворах. Ключевые механизмы и температурные зависимости релаксации. (2 часа)
3. Основные типы ЭПР экспериментов (стационарный и импульсный ЭПР) и модели их описания. (2 часа)
4. Принцип работы и элементы современных ЭПР спектрометров. (2 часа)

5. Матрица плотности. Уравнение Лиувилля - фон Неймана. Формализм спиновых операторов. (2 часа)
6. Эффекты ядерной модуляции электронного спинового эха. Описание 2-х и 3-х импульсной последовательности ESEEM. Методы HYSORE. Оптимизация методов ESEEM. (2 часа)
7. Импульсный двойной электрон-ядерный резонанс (ENDOR). Эксперименты с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR). Методы TRIPLE и ELDOR-detected NMR. (2 часа)
8. Основы дипольной ЭПР спектроскопии. Обменное и диполь-дипольное взаимодействия. Измерение межспиновых расстояний методами стационарного ЭПР. (2 часа)
9. Одночастотные и двухчастотные методы импульсной дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, SIFTER, 2+1, DQC, RIDME, RE). (2 часа)
10. Различные типы спиновых меток, их спектроскопические свойства и особенности применения. Ориентационная селективность. Ортогональные метки. Особенности для систем с 3 и более метками. Методы обработки данных дипольного ЭПР. Достоверность получаемых функций распределения по расстояниям. (2 часа)
11. Импульсы произвольной формы. Оптимизация импульсных последовательностей. Теория оптимального управления спиновыми системами в ЭПР. (2 часа)
12. Особенности ЭПР ионов переходных и редкоземельных металлов. ЭПР в обменно-связанных системах. ЭПР в проводящих системах. (2 часа)
13. Стационарный и импульсный ЭПР в высоких магнитных полях. Чувствительность и разрешение. Релаксация в высоких полях. (2 часа)
14. Альтернативные схемы регистрации ЭПР. Оптическое детектирование. Детектирование ЭПР отдельных молекул. Электрическое детектирование в ЭПР. (2 часа)
15. Методы численных расчетов ЭПР спектров и ЭПР экспериментов. (2 часа)
16. Основы ЭПР томографии. Спиновые зонды. Примеры применения в биологии и медицине. (2 часа)

### **Самостоятельная работа студентов (36 часов)**

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

Примеры некоторых типовых заданий для самостоятельного решения приведены в разделе 10.

### **Перечень учебной литературы.**

#### **5.1. Основная литература**

1. Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса: Новосиб гос. Ун-т, Новосибирск, 2010.

#### **5.2. Дополнительная литература**

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

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса: Новосиб гос. Ун-т, Новосибирск, 2010.

## **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 Современные методы ЭПР спектроскопии 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 по оценочной системе в виде: теоретических опросов, домашних заданий для самостоятельного решения, практической работы по анализу и интерпретации ЭПР-спектров. Оценка знаний, умений, навыков и освоения компетенций обучающимися в рамках текущего контроля может проводиться согласно шкале и критериям, представленным ниже.

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

#### ***Промежуточная аттестация***

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленные компетенции ПК-1 и ПК-2 сформированы не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области Современных методов ЭПР спектроскопии в профессиональной деятельности.

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

Для получения оценки «отлично» (продвинутый уровень усвоения компетенций) необходимо развёрнуто ответить на два вопроса из билета, аргументированно ответить на дополнительные вопросы. В качестве дополнительного вопроса может быть использована задача, аналогичная задачам из заданий, решаемых в течение 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 «Современные методы ЭПР спектроскопии».**

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

## Вопросы на экзамен

*На проверку сформированности компетенции ПК-1:*

Спиновый гамильтониан. Основные взаимодействия в ЭПР. Резонансное поглощение. Спектры ЭПР в жидкости и в твердом теле.

2. Релаксация электронных спинов в твердом веществе и в замороженных растворах. Ключевые механизмы и температурные зависимости релаксации.
3. Основные типы ЭПР экспериментов (стационарный и импульсный ЭПР) и модели их описания.
4. Принцип работы и элементы современных ЭПР спектрометров.
5. Матрица плотности. Уравнение Лиувилля - фон Неймана. Формализм спиновых операторов.
6. Эффекты ядерной модуляции электронного спинового эха. Описание 2-х и 3-х импульсной последовательности ESEEM. Методы HYSCORE. Оптимизация методов ESEEM.
7. Импульсный двойной электрон-ядерный резонанс (ENDOR). Эксперименты с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR).
8. Методы TRIPLE и ELDOR-detected NMR.
9. Основы дипольной ЭПР спектроскопии. Обменное и диполь-дипольное взаимодействия. Измерение межспиновых расстояний методами стационарного ЭПР.

*На проверку сформированности компетенции ПК-2:*

10. Методы импульсной дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, SIFTER, 2+1, DQC).
11. Методы импульсной дипольной ЭПР спектроскопии (DEER/PELDOR, RIDME, RE).
12. Различные типы спиновых меток, их спектроскопические свойства и особенности применения. Ориентационная селективность. Ортогональные метки. Особенности для систем с 3 и более метками.
13. Методы обработки данных дипольного ЭПР. Достоверность получаемых функций распределения по расстояниям.
14. Импульсы произвольной формы. Оптимизация импульсных последовательностей. Теория оптимального управления спиновыми системами в ЭПР.
15. Особенности ЭПР ионов переходных и редкоземельных металлов. ЭПР в обменно-связанных системах.
16. ЭПР в проводящих системах.
17. Стационарный и импульсный ЭПР в высоких магнитных полях. Чувствительность и разрешение. Релаксация в высоких полях.
18. Альтернативные схемы регистрации ЭПР. Оптическое детектирование. Детектирование ЭПР отдельных молекул. Электрическое детектирование в ЭПР.
19. Основы ЭПР томографии. Спиновые зонды. Примеры применения в биологии и медицине

## 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 № \_\_\_\_\_

1. Импульсный двойной электрон-ядерный резонанс (ENDOR). Эксперименты с переносом поляризации (Davies ENDOR, Mims ENDOR) (на компетенцию ПК-1).
2. Альтернативные схемы регистрации ЭПР. Оптическое детектирование. Детектирование ЭПР отдельных молекул. Электрическое детектирование в ЭПР (на компетенцию ПК-2).

Составитель \_\_\_\_\_ / О.А. Крумкачёва /  
(подпись)

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.



**Лист актуализации фонда оценочных средств  
по дисциплине «Современные методы ЭПР спектроскопии»  
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