

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Теория магнитного резонанса Б3.ДВ.8

Направление подготовки: 011200.62 - Физика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Фаткуллин Н.Ф.

Рецензент(ы):

Салихов К.М.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Скирда В. Д.

Протокол заседания кафедры № ____ от "____" ____ 201____г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК № ____ от "____" ____ 201____г

Регистрационный № 6138614

Казань

2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Фаткуллин Н.Ф.
Кафедра физики молекулярных систем Отделение физики , Nail.Fatkullin@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Дается систематическое изложение, основанное на формализме матрицы плотности, общих для ЯМР и ЭПР основ квантовой теории магнитного резонанса. Рассматривается движение спинов в постоянном, радиочастотном и случайном магнитных полях, спиновое эхо Хана, стимулированное спиновое эхо, теория спиновой релаксации, теория линейной реакции спиновой системы на внешнее возмущение и метод моментов.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б3.ДВ.8 Профессиональный" основной образовательной программы 011200.62 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Освоение дисциплины позволит понимать базовые понятия магнитного резонанса и самостоятельно усваивать современную научную литературу, связанную с более специальными вопросами магнитного резонанса. Рекомендуется студентам, специализирующимся по применению различных разделов радиоспектроскопии в конденсированных средах, химической физике и медицинской физике. Для понимания курса необходимо знание общих курсов физики и математики.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук (прежде всего химии, биологии, экологии, наук о земле и человеке) (ОПК-1);
ОПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей (ОПК-2);
ОПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией (ОПК-5);
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин (ПК-1);
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта (ПК-2);

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин (ПК-4);
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований (ПК-5);
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способностью понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований (ПК-6);
ПК-7 (профессиональные компетенции)	способностью участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме (ПК-7);

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основы математического аппарата,
- теорию атомной и молекулярной физики,
- иметь представление о магнитном резонансе, спин-спиновой, спин-решеточной релаксации, о теории линейной реакции, методе моментов.

2. должен уметь:

проводить простейшие расчеты, связанные с проблемой магнитного резонанса.

3. должен владеть:

навыками вычислений с применением методов операторной алгебры.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины должны иметь представление об основных понятиях теории магнитного резонанса. Способны делать численные оценки основных величин.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) 144 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 8 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);
 55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);
 54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Матрица плотности.	8	1	3	3	0	устный опрос
2.	Тема 2. Динамика спина в постоянном магнитном поле.	8	2	3	3	0	устный опрос
3.	Тема 3. Представление взаимодействия в формализации матрицы плотности.	8	3-4	6	6	0	устный опрос контрольная работа
4.	Тема 4. Теория возмущения для матрицы плотности.	8	5	3	3	0	устный опрос
5.	Тема 5. Кинетические уравнения для физических величин.	8	6	3	3	0	устный опрос
6.	Тема 6. Тензор релаксации.	8	7	3	3	0	устный опрос
7.	Тема 7. Релаксация спина в случайному магнитном поле.	8	8	3	3	0	контрольная работа
8.	Тема 8. Метод моментов.	8	9	3	3	0	устный опрос
9.	Тема 9. Общее понятие о кристаллическом поле и спиновом гамильтониане.	8	10	3	3	0	устный опрос
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	экзамен
	Итого			30	30	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Матрица плотности.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Алгебра спиновых операторов, собственные значения и функции спинового оператора. Проекционные операторы. Статистические операторы. Матрица плотности. Уравнение для матрицы плотности.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Решение уравнений для матрицы плотности.

Тема 2. Динамика спина в постоянном магнитном поле.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Магнитный момент. Динамика спина в постоянном магнитном поле. Динамика спина в постоянном и радиочастотном поле. Резонанс. Уравнения Блоха, Эйлера.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Вывод уравнения для движения волчка в магнитном поле. Переход во вращающуюся систему координат.

Тема 3. Представление взаимодействия в формализации матрицы плотности.

лекционное занятие (6 часа(ов)):

Представление Шредингера, представление Гейзенберга, представление взаимодействия в формализации матрицы плотности. Способы описания развития процесса во времени.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Применение представлений в описании процессов, развивающихся во времени.

Тема 4. Теория возмущения для матрицы плотности.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Теория возмущения для матрицы плотности. Хронологическая экспонента Дайсона. Вывод уравнений.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Применение теории возмущения для разложения в ряд матрицы плотности. Расчет вкладов второго порядка по оператору возмущения.

Тема 5. Кинетические уравнения для физических величин.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Кинетические уравнения. Теория Блоха - Вангнесса - Редфилда. Приближение коротких времен релаксации.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Написание кинетических уравнений для физических величин. Движение спина в случайном гауссовом магнитном поле.

Тема 6. Тензор релаксации.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Линейный отклик. Тензор релаксации. Выражение формы сигнала через релаксационную функцию. Примеры.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Построение тензора релаксации. Примеры.

Тема 7. Релаксация спина в случайном магнитном поле.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Релаксация спина в случайном магнитном поле. Вычисления времени спин-решеточной релаксации T1 и спин-спиновой релаксации T2.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Примеры вычисление времен релаксации T2 (спин-решеточная) и T2 (спин-спиновая) для некоторых ситуаций.

Тема 8. Метод моментов.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Обобщенный метод моментов. Секулярные взаимодействия. Общее выражение для момента.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Применение метода моментов на примерах. Расчет второго момента. Обменное сужение.

Тема 9. Общее понятие о кристаллическом поле и спиновом гамильтониане.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Теория кристаллического поля. Общие принципы построения спинового гамильтониана. Примеры спиновых гамильтонианов.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Спектр дипольной пары.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Матрица плотности.	8	1	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
2.	Тема 2. Динамика спина в постоянном магнитном поле.	8	2	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
3.	Тема 3. Представление взаимодействия в формализации матрицы плотности.	8	3-4	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
				подготовка к устному опросу	8	устный опрос
4.	Тема 4. Теория возмущения для матрицы плотности.	8	5	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
5.	Тема 5. Кинетические уравнения для физических величин.	8	6	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
6.	Тема 6. Тензор релаксации.	8	7	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
7.	Тема 7. Релаксация спина в случайному магнитном поле.	8	8	подготовка к контрольной работе	8	контрольная работа
8.	Тема 8. Метод моментов.	8	9	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
9.	Тема 9. Общее понятие о кристаллическом поле и спиновом гамильтониане.	8	10	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
Итого					48	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Освоение дисциплины "Теория магнитного резонанса" предполагает использование в учебном процессе как традиционных (лекции, практические занятия с использованием методических материалов), так и инновационных образовательных технологий с применением активных и интерактивных форм проведения занятий: использование мультимедийных программ для подготовки и выступления студентов на семинарских занятиях с фото-, аудио- и видеоматериалами по предложенной тематике.

Используются такие образовательные технологии:

- проверка домашних заданий,
- проверка решений предложенных задач по изучаемому материалу;
- постановка перед студентами вопроса по теме, которая еще только будет изучаться, и студенты должны дать ответ, основываясь на интуиции, а затем этот вопрос подробно изучается.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Матрица плотности.

устный опрос , примерные вопросы:

Определение собственных значений и собственных функций спинового оператора. Определение матрицы плотности. Проекционные операторы. Уравнение для матрицы плотности.

Тема 2. Динамика спина в постоянном магнитном поле.

устный опрос , примерные вопросы:

Определение магнитного момента. Различие динамики спина в постоянном и радиочастотном поле. Условие резонанса. Уравнения Блоха, Эйлера.

Тема 3. Представление взаимодействия в формализации матрицы плотности.

контрольная работа , примерные вопросы:

1. Представление матрицы плотности. 2. Вывод уравнения Блоха. 3. Вывод уравнения Эйлера. 4. Представление Шредингера.

устный опрос , примерные вопросы:

Способы описания развития процесса во времени (Шредингер, Гейзенберг, представление взаимодействия)

Тема 4. Теория возмущения для матрицы плотности.

устный опрос , примерные вопросы:

Разложение матрицы плотности применяя теорию возмущений.

Тема 5. Кинетические уравнения для физических величин.

устный опрос , примерные вопросы:

Запись кинетических уравнений для физических величин. Теория Блоха - Вангнесса - Редфилда.

Тема 6. Тензор релаксации.

устный опрос , примерные вопросы:

Выражение формы сигнала через релаксационную функцию. Определение тензора релаксации.

Тема 7. Релаксация спина в случайном магнитном поле.

контрольная работа , примерные вопросы:

1. Вычисление времени спин-решеточной релаксации T1 2. Вычисление времени спин-спиновой релаксации T2.

Тема 8. Метод моментов.

устный опрос , примерные вопросы:

Общее выражение для момента. Примеры.

Тема 9. Общее понятие о кристаллическом поле и спиновом гамильтониане.

устный опрос , примерные вопросы:

Основные понятия теории кристаллического поля. Общие понятия о спиновом гамильтониане. Примеры спиновых гамильтонианов.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Форма аттестации: экзамен. (ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-4, ПК-5)

Максимальное количество баллов - 100

Устный опрос, контрольные работы - 50 (ОПК-5, ПК-1, ПК-2, ПК-4, ПК-5, ПК-6, ПК-7)

ПРИМЕРНЫЕ ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

1. Кристаллическое поле. Спиновый гамильтониан.
2. Представление Шредингера.
3. Тензор релаксации.
4. Метод моментов.
5. Представление Гейзенберга.
6. Динамика спина в постоянно магнитном поле.
7. Кинетические уравнения.
8. Времена релаксации.
9. Релаксация спина в случайном магнитном поле.
10. Явление резонанса.
11. Матрица плотности.

Полный список вопросов на экзамен приведен в Приложении 1.

7.1. Основная литература:

1. Зарипов М.М. Основы теории спектров электронного парамагнитного резонанса в кристаллах: курс лекций / М. М. Зарипов. - Казань: Казанский государственный университет, 2009. - 212 с.
2. Сергеев, Н. А. Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса : монография / Н. А. Сергеев, Д. С. Рябушкин. - М. : Логос, 2013. - 272 с.
<http://znamium.com/catalog.php?bookinfo=469025>
3. Фаткуллин Н.Ф. Обобщенные кинетические уравнения Блоха-Вангнесса-Редфилда [Электронный ресурс]/ Н.Ф.Фаткуллин. - Учебное пособие, Казань, 2004. - 21с. Режим доступа - <http://kpfu.ru/metodicheskie-posobiya-studentam-4083.html>

7.2. Дополнительная литература:

1. Каратаева Ф.Х. Спектроскопия ЯМР в органической химии: Ч.1: Общая теория ЯМР. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C [учебное пособие] / Ф. Х. Каратаева, В. В. Клочков. - Казань: Казан. Ун-т, 2013. - 130 с.
2. Ядерный магнетизм / А. Абрагам ; пер. с англ. под ред. Г. В. Скроцкого .? Москва : Изд-во иностранной литературы, 1963 .? 551 с. ; 27 .? Пер. изд.: The principles of nuclear magnetism / A. Abragam (Oxford: Clarendon Press, 1961) .? Указ. ядер: с. 533-539 .? Библиогр.: с. 540-546.

7.3. Интернет-ресурсы:

Кафедра химической физики - http://portal.kpfu.ru/main_page?p_sub=5731

Образовательный проект Варгина А.Н. - <http://www.ph4s.ru/index.html>

Релаксация магнитная - http://femto.com.ua/articles/part_2/3383.html

Физическая энциклопедия: Спиновый гамильтониан -
http://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_physics/4774/СПИНОВЫЙ

Хроника открытия магнитного резонанса -

<http://kpfu.ru/museums/muzej-laboratoriya-ekzavojskogo/nauchnaya-deyatelnost/chronika-otkrytiya-magnitnogo-rezonans>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Теория магнитного резонанса" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "БиблиоРоссика", доступ к которой предоставлен студентам. В ЭБС "БиблиоРоссика" представлены коллекции актуальной научной и учебной литературы по гуманитарным наукам, включающие в себя публикации ведущих российских издательств гуманитарной литературы, издания на английском языке ведущих американских и европейских издательств, а также редкие и малотиражные издания российских региональных вузов. ЭБС "БиблиоРоссика" обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Аудитория, оборудованная мультимедийным проектором, ноутбуком, экраном, учебной доской.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.62 "Физика" и профилю подготовки не предусмотрено .

Автор(ы):

Фаткуллин Н.Ф. _____
"___" 201 ___ г.

Рецензент(ы):

Салихов К.М. _____
"___" 201 ___ г.