

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



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по образовательной деятельности КФУ
Проф. Д.А. Таюрский

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Основы теории спектров ядерного магнитного резонанса Б1.В.ДВ.15

Направление подготовки: 03.03.03 - Радиофизика

Профиль подготовки: Физика магнитных явлений

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Егоров А.В.

Рецензент(ы):

Скирда В.Д.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Тагиров М. С.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 6139018

Казань

2018

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) Егоров А.В. , Alexander.Egorov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Основы теории спектров ЯМР" является изучение классического и квантовомеханического описания движения спинов в магнитном поле, влияния спин-спинового и квадрупольного взаимодействий на спектры ЯМР.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.15 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 03.03.03 Радиофизика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина "Основы теории спектров ЯМР" относится к вариативной части профессионального цикла (Б.3 ДВ11) подготовки бакалавров по направлению 011800.62 - "Радиофизика" и является одним из разделов физики конденсированного состояния. Предполагается знание студентами общей физики, квантовой механики (нерелятивистской теории) и линейной алгебры. Освоение данной дисциплины предшествует лабораторному практикуму по радиоспектроскопии и способствует выполнению квалификационных работ.

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 к овладению базовыми знаниями в области математики и естественных наук, их использованию в профессиональной деятельности
ОПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью самостоятельно приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности
ОПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью понимать принципы работы и методы эксплуатации современной радиоэлектронной и оптической аппаратуры и оборудования
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью использовать основные методы радиофизических измерений

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

теоретические основы спектроскопии ЯМР

2. должен уметь:

рассчитывать спектры ЯМР при наличии зеемановского, квадрупольного и спин-спинового взаимодействий

3. должен владеть:

навыками расчета величины сигнала ЯМР и отношения сигнал/шум

4. должен демонстрировать способность и готовность:

рассчитывать и интерпретировать спектры ЯМР

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 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. Движение свободных спинов в лабораторной и вращающейся системах координат (классический и квантовомеханический анализ).	8	1-3	3	4	0	Письменное домашнее задание
2.	Тема 2. ЯМР в системах связанных спинов. Адиабатически быстрое прохождение через резонанс. Релаксационные эффекты. Однородная и неоднородная ширина линии ЯМР.	8	4-6	3	4	0	Письменное домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
3.	Тема 3. Уравнения Блоха. Медленное прохождение через резонанс. Комплексная парамагнитная восприимчивость. Теория отклика. Преобразование Фурье. Соотношения Крамерса-Кронига.	8	7-9	3	4	0	Письменное домашнее задание
4.	Тема 4. Матрица плотности. Общая квантовомеханическая теория магнитного поглощения. Функция корреляции поперечной намагниченности.	8	10-12	3	4	0	Письменное домашнее задание
5.	Тема 5. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие в жесткой решетке. Моменты кривой резонансного поглощения. Гауссова и лоренцева функции формы линии ЯМР. Связь моментов линии ЯМР с функцией корреляции поперечной намагниченности.	8	13-15	3	6	0	Письменное домашнее задание
6.	Тема 6. Электрическое квадрупольное взаимодействие. Ядерный спиновый гамильтониан. Тонкая структура спектра ЯМР, обязанная слабому квадрупольному взаимодействию.	8	16-18	3	6	0	Письменное домашнее задание
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	Экзамен
	Итого			18	28	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Движение свободных спинов в лабораторной и вращающейся системах координат (классический и квантовомеханический анализ).

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Классическое уравнение движения момента в магнитном поле. Вращающаяся и лабораторная системы координат (ВСК и ЛСК). Уравнение движения в ВСК. Влияние переменного магнитного поля. Спад спиновой индукции. Сигнал спинового эхо. Адиабатически быстрое прохождение. Уравнение Шредингера. Эквивалентность классического и квантовомеханического уравнений движения. Матрица плотности.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Рассчитать величину стационарного сигнала ЯМР при параметрах датчика, указанных преподавателем. Сравнить чувствительность спектрометров, использующих метода Q-метра, с автодинными.

Тема 2. ЯМР в системах связанных спинов. Адиабатически быстрое прохождение через резонанс. Релаксационные эффекты. Однородная и неоднородная ширина линии ЯМР.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Введение понятия о релаксации. Кинетические уравнения для системы невзаимодействующих спинов. Вероятность переходов под действием возмущения, зависящего от времени. Вероятность релаксационных переходов. Поглощение энергии. Стационарное решение кинетических уравнений.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Рассчитать величину импульсного сигнала ЯМР, для образца указанного преподавателем. Оценить отношение сигнал/шум.

Тема 3. Уравнения Блоха. Медленное прохождение через резонанс. Комплексная парамагнитная восприимчивость. Теория отклика. Преобразование Фурье. Соотношения Крамерса-Кронига.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Уравнения Блоха в ВСК. Анализ стационарных решений. Поглощение и дисперсия. Форма линии ЯМР. Явление релаксационного уширения. Линейная теория отклика. Преобразование Фурье в спектроскопии. Соотношения Крамерса-Кронига.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Получить выражение для обратного фурье-преобразования, исходя из прямого. Использовать интегральное представление дельта-функции.

Тема 4. Матрица плотности. Общая квантовомеханическая теория магнитного поглощения. Функция корреляции поперечной намагниченности.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Общая квантовомеханическая теория магнитного поглощения в жесткой решетки. Две формы записи решения уравнения для матрицы плотности. Сокращенная автокорреляционная функция. Соотношение стационарного и импульсного сигналов ЯМР.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Разработать алгоритм нахождения собственных значений и собственных векторов эрмитовой матрицы, основанный на методе Якоби.

Тема 5. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие в жесткой решетке. Моменты кривой резонансного поглощения. Гауссова и лоренцева функции формы линии ЯМР. Связь моментов линии ЯМР с функцией корреляции поперечной намагниченности.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Диполь-дипольное взаимодействие в жесткой решетке. Секулярная часть диполь-дипольного взаимодействия. Метод моментов Ван-Флека. Вычисление вторых моментов линии поглощения.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Рассчитать форму линии ЯМР для случая, когда можно ограничиться членом А секулярной части диполь-дипольного взаимодействия, используя теорему о свертке.

Тема 6. Электрическое квадрупольное взаимодействие. Ядерный спиновый гамильтониан. Тонкая структура спектра ЯМР, обусловленная слабым квадрупольным взаимодействием.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Квадрупольные моменты ядер. Гамильтониан квадрупольного взаимодействия. Спектры ЯМР в случае слабого квадрупольного взаимодействия (расчет во втором порядке теории возмущений). Спектры ЯМР в порошках при наличии квадрупольного взаимодействия. Описание импульсного ЯКР с помощью формализма фиктивных спинов.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Рассчитать форму линии ЯМР в порошке при наличии квадрупольного взаимодействия в первом порядке теории возмущений. Рассчитать форму центральной линии во втором порядке теории возмущений. ($I=3/2$).

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. Движение свободных спинов в лабораторной и вращающейся системах координат (классический и квантовомеханический анализ).	8	1-3	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
2.	Тема 2. ЯМР в системах связанных спинов. Адиабатически быстрое прохождение через резонанс. Релаксационные эффекты. Однородная и неоднородная ширина линии ЯМР.	8	4-6	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
3.	Тема 3. Уравнения Блоха. Медленное прохождение через резонанс. Комплексная парамагнитная восприимчивость. Теория отклика. Преобразование Фурье. Соотношения Крамерса-Кронига.	8	7-9	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
4.	Тема 4. Матрица плотности. Общая квантовомеханическая теория магнитного поглощения. Функция корреляции поперечной намагниченности.	8	10-12	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
5.	Тема 5. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие в жесткой решетке. Моменты кривой резонансного поглощения. Гауссова и лоренцева функции формы линии ЯМР. Связь моментов линии ЯМР с функцией корреляции поперечной намагниченности.	8	13-15	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
6.	Тема 6. Электрическое квадрупольное взаимодействие. Ядерный спиновый гамильтониан. Тонкая структура спектра ЯМР, обязанная слабому квадрупольному взаимодействию.	8	16-18	подготовка домашнего задания	5	домашнее задание
Итого					35	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

лекции, домашние задания, интернет

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

Тема 1. Движение свободных спинов в лабораторной и вращающейся системах координат (классический и квантовомеханический анализ).

домашнее задание , примерные вопросы:

Рассчитать величину сигнала ССИ 19F в CaF₂ . Частота 10МГц, температура 300К, объем катушки и образца равен 1 см³, катушка содержит 10 витков диаметром 6мм, добротность контура -50. Оценить величину отношения сигнал/шум.

Тема 2. ЯМР в системах связанных спинов. Адиабатически быстрое прохождение через резонанс. Релаксационные эффекты. Однородная и неоднородная ширина линии ЯМР.

домашнее задание , примерные вопросы:

В кристаллическом веществе на ядерный спин действует локальное статическое поле h , направленное вдоль кристаллографической оси c . Рассчитать форму линии ЯМР в порошке.

Тема 3. Уравнения Блоха. Медленное прохождение через резонанс. Комплексная парамагнитная восприимчивость. Теория отклика. Преобразование Фурье. Соотношения Крамерса-Кронига.

домашнее задание , примерные вопросы:

Записать Фурье-преобразования с использованием циклической частоты. Исходя из выражения для прямого фурье-преобразования, получить формулу для обратного фурье-преобразования.

Тема 4. Матрица плотности. Общая квантовомеханическая теория магнитного поглощения. Функция корреляции поперечной намагниченности.

домашнее задание , примерные вопросы:

Пользуясь формализмом матрицы плотности описать явление солид-эхо.

Тема 5. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие в жесткой решетке. Моменты кривой резонансного поглощения. Гауссова и лоренцева функции формы линии ЯМР. Связь моментов линии ЯМР с функцией корреляции поперечной намагниченности.

домашнее задание , примерные вопросы:

Рассчитать величину стационарного сигнала ЯМР ^1H в H_2O . Частота 10МГц, температура 300К, объем катушки и образца равен 1 см³, катушка содержит 10 витков диаметром 6мм, добротность контура -50. Ширина линии 0,1 Э. Оценить величину отношения сигнал/шум.

Тема 6. Электрическое квадрупольное взаимодействие. Ядерный спиновый гамильтониан. Тонкая структура спектра ЯМР, обязанная слабому квадрупольному взаимодействию.

домашнее задание , примерные вопросы:

В первом порядке теории возмущений рассчитать поправки к уровням энергии ядерного момента, обладающего квадрупольным моментом. Получить выражения для произвольного спина.

Итоговая форма контроля

экзамен

Примерные вопросы к экзамену:

Вопросы экзаменационных билетов.

1. Движение свободных спинов в лабораторной и вращающейся системах координат (классический и квантовомеханический анализ). Спиновое эхо.
 2. ЯМР в системах связанных спинов. Релаксационные эффекты. Однородная и неоднородная ширина линии ЯМР.
 3. Уравнения Блоха. Медленное прохождение через резонанс. Комплексная парамагнитная восприимчивость.
 4. Матрица плотности. Общая квантовомеханическая теория магнитного поглощения. Функция корреляции поперечной намагниченности.
 5. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие в жесткой решетке.
 6. Моменты кривой резонансного поглощения. Связь моментов с функцией корреляции поперечной намагниченности.
 7. Электрическое квадрупольное взаимодействие. Ядерный спиновый гамильтониан.
 8. Тонкая структура спектра ЯМР, обязанная слабому квадрупольному взаимодействию.
 9. Спектры ЯКР. Формирование сигнала импульсного ЯМР.
 10. Расчет параметров ядерного спинового гамильтониана редкоземельного иона в ван-флековских парамагнетиках.
 11. Спиновое эхо при наличии слабого квадрупольного взаимодействия.
- Магнитные электронно-ядерные взаимодействия в свободном атоме и в молекуле.

12. Химический сдвиг линии ЯМР. Диамагнитная и парамагнитная составляющие химсдвига в жидкости.
13. ЯМР в металлах: модель свободных электронов (плотность состояний, энергия Ферми, восприимчивость Паули). Изотропный и анизотропный сдвиг Найта.
14. ЯМР в парамагнетиках. Парамагнитная восприимчивость (формула Ван-Флека). Резонанс ядер парамагнитных ионов в дублетном состоянии.
15. ЯМР в парамагнетиках. Резонанс ядер диамагнитных лигандов при высоких и низких температурах.

7.1. Основная литература:

1. Сергеев, Н. А. Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса : монография / Н. А. Сергеев, Д. С. Рябушкин. - М. : Логос, 2013. - 272 с. - ISBN 978-5-98704-754-5.
<http://znanium.com/bookread.php?book=469025>
2. Атомная физика. Теоретические основы и лабораторный практикум: Уч. пос. / В.Е.Граков, С.А.Маскевич и др.; Под общ. ред. А.П.Клищенко. - М.: ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2011. - 333с.: 60x90 1/16. - (Высшее обр.). (п) ISBN 978-5-16-004688-4, 800 экз.
<http://znanium.com/bookread.php?book=218015>
3. Давыдов А. С. Квантовая механика: учеб. пособие. ? 3 изд., стереотипное. ? СПб.: БХВ-Петербург, 2011. ? 704 с.
<http://znanium.com/bookread.php?book=351130>
4. Физика твердого тела: Учебное пособие / Ю.А. Стрекалов, Н.А. Тенякова. - М.: ИЦ РИОР: НИЦ Инфра-М, 2013. - 307 с
<http://znanium.com/bookread.php?book=363421>
5. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости.- М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. - 384 с. - ISBN 978-5-9221-1202-4.
<http://e.lanbook.com/view/book/2151/page35/>

7.2. Дополнительная литература:

1. Ядерный магнетизм / А. Абрагам; пер. с англ. под ред. Г. В. Скроцкого. ?Москва: Изд-во иностранной литературы, 1963. ?551 с
2. Основы теории магнитного резонанса: перевод с английского / Ч. Сликтер; Пер. Н. Н. Корста и др.; Под ред. Г. В. Скроцкого. ?Издание 2-е, пересмотренное, дополненное и исправленное. ?Москва: Мир, 1981. ?448 с
3. Спиновая температура и ЯМР в твердых телах: перевод с английского / М. Гольдман; Пер. А. И. Реза, М. Е. Сарычева; Под ред. Г. В. Скроцкого. ?Москва: Мир, 1972. ?342 с

7.3. Интернет-ресурсы:

- американское физическое общество - www.aps.org
казанский университет - www.kpfu.ru
научная поисковая система - www.scopus.com
свободная энциклопедия - ru.wikipedia.org
электронная библиотека - www.ekniga.ru

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Основы теории спектров ядерного 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 "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.

мультимедийный комплекс для чтения лекций

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 03.03.03 "Радиофизика" и профилю подготовки Физика магнитных явлений .

Автор(ы):

Егоров А.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Скирда В.Д. _____

"__" _____ 201__ г.