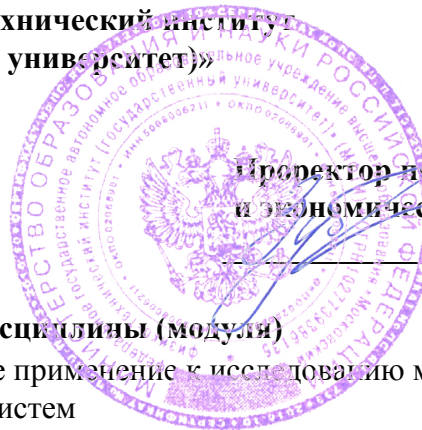


**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(государственный университет)»**



«УТВЕРЖДАЮ

**Проректор по учебной работе
и экономическому развитию**

_____ **Д.А. Зубцов**

по дисциплине: **Рабочая программа дисциплины (модуля)**
ЭПР спектроскопия и ее применение к исследованию микродисперсных и супрамолекулярных систем

по направлению: Прикладные математика и физика (бакалавриат)

профиль подготовки: Химическая физика и свойства наноструктур
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра физики супрамолекулярных систем и нанофотоники

курс: 4

квалификация: бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7(Осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

практические и семинарские занятия: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 48 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 108, всего зач. ед.: 3

Программу составил: В.А. Лившиц, д-р хим. наук, профессор

Программа обсуждена на заседании кафедры

10 июля 2015 г.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой

М.В. Алфимов

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

Декан факультета

В.М. Некипелов

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Целью курса является изучение физических основ спектроскопии электронного парамагнитного резонанса и демонстрация его различных применений для определения структурных и молекулярно-динамических параметров в микродисперсных химических и биологических системах и супрамолекулярных комплексах гость/хозяин.

Задачи дисциплины

- освоение студентами знаний в области общей теории электронного парамагнитного резонанса (ЭПР);
- приобретение знаний в области использования различных подходов в ЭПР спектроскопии для исследования структуры и молекулярной динамики различных структурно-упорядоченных химических и биологических систем: фосфолипидных мембран, белков, полимерных латексов, мицелл, нано/микрочастиц силикагелей, супрамолекулярных комплексов гость/хозяин с циклодекстринами и кукурбитурилами (определение коэффициентов вращательной и поступательной диффузии, межмолекулярных расстояний, поверхностных электрических потенциалов и др.).

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Данная дисциплина относится к вариативной части образовательной программы.

Дисциплина «ЭПР спектроскопия и ее применение к исследованию микродисперсных и супрамолекулярных систем» базируется на дисциплинах:

- Общая и неорганическая химия;
- Физические методы исследований;
- Введение в математический анализ;
- Вычислительная математика;
- Линейная алгебра;
- Основы химической физики;
- Общая физика: термодинамика и молекулярная физика;
- Общая физика: оптика;
- Аналитическая геометрия;
- Общая физика: механика;
- Общая физика: электричество и магнетизм;
- Общая физика: квантовая физика.

Дисциплина «ЭПР спектроскопия и ее применение к исследованию микродисперсных и супрамолекулярных систем» предшествует изучению дисциплин:

Научно-исследовательская работа.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

- способность применять теорию и методы математики для построения качественных и количественных моделей объектов и процессов в естественнонаучной сфере деятельности (ОПК-2);
- способность понимать ключевые аспекты и концепции в области их специализации (ОПК-3);

способность применять полученные знания для анализа систем, процессов и методов (ОПК-4).

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- основы современных представлений в области электронного парамагнитного резонанса, физики и химии дисперсных и супрамолекулярных систем основы стереохимии, координационной химии;
- принципы построения и молекулярной динамики супрамолекулярных химических и биологических систем;
- постановку проблем физико-химического моделирования;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

уметь:

- пользоваться справочной литературой по физике и химии научного и прикладного характера для быстрого поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- понять, какие свойства нужно придать системе для проявления возможности супрамолекулярной сборки или самоорганизации;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- оценить соответствие самоорганизованной системы поставленной задаче.

владеть:

- химической терминологией, терминологией физики электронного парамагнитного резонанса и супрамолекулярной химии;
- методами математического моделирования спектров электронного парамагнитного резонанса, процессов адсорбции, комплексообразования и самосборки;
- научной картиной мира.

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

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу				
		Лекции	Практические и семинарские занятия	Лаборат. работы	Задания, курсовые работы	Самост. работа
1	Импульсные методы: свободная индукция и спиновое эхо	4				2
2	Исследование комплексов циклодекстринов со спин-мечеными молекулами гостей в растворах и твердой фазе	2				4
3	Методы определения времен корреляции вращения спин-меченых молекул в области быстрых, медленных и сверхмедленных вращений	2				2
4	Методы определения полярности и микровязкости микроокружения с помощью спиновых меток и зондов	2				4

5	Определение молекулярной подвижности, ориентационной упорядоченности, межмолекулярных расстояний и электростатических потенциалов на поверхностях нано/микрочастиц силикагелей и полимерных латексов.	2				2
6	Определение параметров упорядоченности в биологических и модельных мембранах	2				4
7	Понятие магнитного резонанса	2				2
8	Спиновая релаксация	2				6
9	Уравнения Блоха	2				4
10	Форма линии и молекулярное движение	2				4
11	Химическая поляризация электронов и ядер раствора	2				4
12	Электронный парамагнитный резонанс в жидкости	2				2
13	Электронный парамагнитный резонанс радикалов в твердых телах	2				4
14	ЭПР триплетных состояний и ионов переходных металлов	2				4
Итого часов		30				48
Подготовка к экзамену		30 час.				
Общая трудоёмкость		108 час., 3 зач.ед.				

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 7 (Осенний)

1. Импульсные методы: свободная индукция и спиновое эхо

Угол поворота, неселективное и селективное возбуждение.

Спад свободной индукции. Метод Кара-Перселла. Стимулированное эхо. Метод насыщения (инверсии)-восстановления. Перенос насыщения.

2. Исследование комплексов циклодекстринов со спин-мечеными молекулами гостей в растворах и твердой фазе

Исследование термодинамики связывания, ориентации и молекулярной динамики спин-меченых молекул гостей в супрамолекулярных комплексах с циклодекстринами с помощью спиновых меток и квантово-химических расчетов.

3. Методы определения времен корреляции вращения спин-меченых молекул в области быстрых, медленных и сверхмедленных вращений

Физические механизмы, приводящие к областям быстрых, медленных и сверхмедленных вращений в спектрах ЭПР в отсутствие и в присутствии СВЧ насыщения.

Методы теоретического моделирования изотропных и анизотропных вращений.

4. Методы определения полярности и микровязкости микроокружения с помощью спиновых меток и зондов

Зависимости электрон-ядерного сверхтонкого взаимодействия и величины g-фактора от полярности окружения и механизмы этих зависимостей. Связь между временем корреляции вращения или числом столкновений и микровязкостью растворителя.

5. Определение молекулярной подвижности, ориентационной упорядоченности, межмолекулярных расстояний и электростатических потенциалов на поверхностях нан

Структурные особенности нано/микрочастиц силикагелей с адсорбированными или ковалентно связанными циклодекстринами. Использование спиновых меток различной степени гидрофобности и знака электрического заряда для определения закономерностей адсорбции, комплексообразования и потенциала поверхности нано/микрочастиц.

6. Определение параметров упорядоченности в биологических и модельных мембранах

Анизотропия молекулярных ориентаций в спектрах ЭПР

спиновых меток и зондов ориентированных и макроскопически неориентированных структурах. Зависимость параметров порядка от температуры, липидного состава мембран и присутствия холестерина. Фазовая гетерогенность.

7. Понятие магнитного резонанса

Магнитный момент и ларморова прецессия. Оператор момента импульса.

Магнитные моменты электронов и ядер.

Резонансное поглощение.

Макроскопическая намагниченность.

Кинетические уравнения для населенностей

8. Спиновая релаксация

Продольная и поперечная релаксация. Продольная релаксация в двухуровневой системе. Матрица плотности и фазовая когерентность состояний Поперечная релаксация в двухуровневой системе. Одно родная и неоднородная ширина линии.

Механизмы спиновой релаксации.

9. Уравнения Блоха

Движение магнитного момента. Уравнения Блоха. Вращающаяся система координат, эффективное поле.

Классическое описание резонанса Поглощаемая мощность.

10. Форма линии и молекулярное движение

Эффекты химического и Гейзенберговского обмена в спектрах магнитного резонанса. Модифицированные уравнения Блоха. Медленный обмен; быстрый обмен; обмен по нескольким положениям или ориентациям.

11. Химическая поляризация электронов и ядер раствора

Химическая поляризация и ее механизмы. Радикальная пара, поляризация электронов. Синглет-триплетная конверсия в радикальной паре, поляризация ядер.

12. Электронный парамагнитный резонанс в жидкости

Сверхтонкие взаимодействия.

Уровни энергии радикала с одним и несколькими ядрами. Формулы Брейта-Раби. Контактное СТВ в органических радикалах.

13. Электронный парамагнитный резонанс радикалов в твердых телах

ЭПР в твердых телах. Тензор СТВ. Уровни энергии и частоты переходов. Интенсивности переходов.

14. ЭПР триплетных состояний и ионов переходных металлов

Триплетные органические молекулы и триплетные возбужденные состояния. Уровни энергии и волновые функции; разрешенные переходы. Химические соединения переходных металлов. Теория кристаллического поля.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Необходимое оборудование для лекций: компьютер и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

6. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная литература

1. V. A. Livshits, D. Marsh HF EPR spectra of Spin Labels in Membranes Biological Magnetic Resonance, Vol. 22, Chapter 13 (2004)
2. S. Eaton and G.R. Eaton. Distance measurements by CW and Pulsed EPR Biological Magnetic Resonance, Vol. 19, Chapter 1 (2003)
3. D. Marsh, T. Pali, L. Horvath. Progressive saturation and Saturation Transfer EPR for Measuring Exchange processes and Proximity Relations in Membranes Biological Magnetic Resonance, Vol. 14, Chapter 2 (2002)
4. Лившиц В. А., Ионова И. В. и др. Супрамолекулярные комплексы спин-меченых и люминесцентных молекул с циклодекстринами. Российские нанотехнологии.-2011.-Т.6.-№11-12 С.27-42
5. Лившиц В. А., И. В. Ионова, М. В. Алфимов Адсорбция и динамика молекул на гидрофобизированных микрочастицах двуокиси кремния. Исследование методом ЭПР спектроскопии спиновых зондов. Российские нанотехнологии. – 2011. – Т. 6 – выпуск 1-2. – С. 89-95.
6. Лившиц В. А., И. В. Ионова, Д. Марш. Самоорганизация и фазовая структура трехкомпонентных липидных мембран. Исследование методом ЭПР спектроскопии спиновых зондов. Российские нанотехнологии. – 2010. – Т. 5 – выпуск 9-10. – С. 27-34.
7. Лившиц В. А., И. В. Демишева, Б. Г. Дзиковский, В. Г. Авакян, М. В. Алфимов. Структура и молекулярная динамика трехкомпонентных комплексов циклодекстринов со спин-мечеными индолами и углеводородами в твердой фазе. ЭПР спектроскопия и квантово-химические расчеты. Изв. АН сер. Химич, 2006, № 12, 2081-2093
8. С. А. Дзюба. Основы магнитного резонанса. Издательство Новосибирского Государственного Университета. 1994 г.

Дополнительная литература

1. Кэррингтон, МакЛачлан Магнитный резонанс М. 1967 г.
2. А. Абрагам Ядерный магнитный резонанс М.1961г.
3. А. Н. Кузнецов Метод спинового зонда Москва 1981г.
4. А. М. Вассерман А. Л. Коварский. Спиновые метки и зонды в физико-химии полимеров. М. 1986г.
5. Метод спиновых меток в молекулярной биологии Т. 1. под редакцией Л. Берлинера. 1981 г.
6. Метод спиновых меток в молекулярной биологии. Т. 2. под редакцией Л. Берлинера. 1981 г.
7. К. И. Замаев, К. М. Салихов, Спиновый обмен.1980 г. Новосибирск.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

<http://www.springerlink.com>, <http://www.sensors-research.com>, <http://www.nanojournal.ru>,
<http://pubs.acs.org>.

8. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

9. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения

Приложение

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

по направлению: Прикладные математика и физика (бакалавриат)
профиль подготовки: Химическая физика и свойства наноструктур
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра физики супрамолекулярных систем и нано
курс: 4
квалификация: бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7(Осенний) - Экзамен

Разработчик: В.А. Лившиц, д-р хим. наук, профессор

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

способность применять теорию и методы математики для построения качественных и количественных моделей объектов и процессов в естественнонаучной сфере деятельности (ОПК-2);

способность понимать ключевые аспекты и концепции в области их специализации (ОПК-3);

способность применять полученные знания для анализа систем, процессов и методов (ОПК-4).

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «ЭПР спектроскопия и ее применение к исследованию микродисперсных и супрамолекулярных систем» обучающийся должен:

знать:

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- основы современных представлений в области электронного парамагнитного резонанса, физики и химии дисперсных и супрамолекулярных систем основы стереохимии, координационной химии;
- принципы построения и молекулярной динамики супрамолекулярных химических и биологических систем;
- постановку проблем физико-химического моделирования;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

уметь:

- пользоваться справочной литературой по физике и химии научного и прикладного характера для быстрого поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- понять, какие свойства нужно придать системе для проявления возможности супрамолекулярной сборки или самоорганизации;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- оценить соответствие самоорганизованной системы поставленной задаче.

владеть:

- химической терминологией, терминологией физики электронного парамагнитного резонанса и супрамолекулярной химии;
- методами математического моделирования спектров электронного парамагнитного резонанса, процессов адсорбции, комплексообразования и самосборки;
- научной картиной мира.

3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

1. Условия магнитного резонанса. Макроскопическая намагниченность и поглощение энергии СВЧ поля. Кинетические уравнения для населенностей
2. Уравнения Блоха во вращающейся системе координат. Эффективное магнитное поле. Решения уравнений Блоха для стационарного случая.
3. Сверхтонкие взаимодействия. Расщепление за счет СТВ в жидкости
4. Анизотропия сверхтонких взаимодействий в твердых телах. Угловая зависимость спектра и интенсивности переходов
5. Триpletные состояния при фотовозбуждении. Расщепления в нулевом поле
6. Природа зависимости формы спектра ЭПР радикала от молекулярного движения. Химический обмен и молекулярные вращения

7. Спиновая релаксация – продольная и поперечная релаксация. Механизмы релаксации. Зависимость от магнитных взаимодействий и молекулярной подвижности
8. Механизмы динамической поляризации ядер и повышение чувствительности спектров ЯМР путем динамической поляризации ядер.
9. Методы определения полярности микроокружения с помощью спиновых меток и зондов
10. Методы определения микровязкости окружения с помощью спиновых меток и зондов
11. Методы определения времен корреляции вращения спин-меченых молекул в области быстрых вращений
12. Методы определения времен корреляции вращения спин-меченых молекул в области медленных вращений.
13. Спектроскопия с переносом СВЧ насыщения Методы определения времен корреляции вращения спин-меченых молекул в области сверхмедленных вращений
14. Определение параметров частично усредненной магнитной анизотропии из спектров ЭПР
15. Определение параметров упорядоченности в биологических и модельных мембранах
16. Определение поверхностных потенциалов с помощью спиновых меток и зондов
17. Определение трансмембранных электрических потенциалов с использованием спиновых зондов
18. Чувствительность спектров ЭПР к анизотропии (несферичности) молекулярного вращения и определение несферичности молекулярного вращения спиновых зондов путем теоретического моделирования спектров ЭПР.
19. Спектроскопия ЭПР в высоких магнитных полях и чувствительность спектров ЭПР в высоких магнитных полях к анизотропии молекулярного вращения
20. Определение амплитудных и частотных параметров молекулярного вращения - быстрые либрации малой амплитуды и медленная вращательная диффузия в полном телесном угле
21. Природа зависимости изотропного сверхтонкого расщепления в спектрах ЭПР спиновых меток и зондов от полярности окружения.
22. Определение компонент тензоров сверхтонкого взаимодействия и g -фактора в твердой фазе
23. Проявление дипольного взаимодействия в спектрах ЭПР в твердой фазе.
24. Определение расстояний между парамагнитными центрами из анализа формы спектров ЭПР.
25. Проявление обменного взаимодействия в спектрах ЭПР спиновых зондов в растворах.
26. Определение коэффициентов трансляционной диффузии из обменного уширения линий ЭПР.
27. Физические механизмы, определяющие возникновение гауссовой и лоренцевой формы линий ЭПР
28. Супрерсверхтонкое взаимодействие и механизм его возникновения.
29. Явление СВЧ насыщения и определение времен магнитной релаксации из кривых СВЧ насыщения в стационарных спектрах ЭПР.
30. Явление электронного спинового эха и измерение времен поперечной и продольной релаксации методом спинового эха. магнитно.

4. Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Вопрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.