

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау
А.В. Рогачев**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Методы ядерного магнитного резонанса
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра физики и техники низких температур
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 45 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: А.М. Тихонов, д-р физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры физики и техники низких температур 01.04.2024

Аннотация

Систематически рассмотрены особенности явлений ЯМР в магнитоупорядоченных и парамагнитных веществах, металлах, жидкостях и твердых телах, а также освещено практическое применение методов ЯМР в химии, медицине и биологии.

Программа рассчитана на студентов старших курсов, специализирующихся в области физики конденсированного состояния, физики твердого тела, физики низких температур.

Курс предполагается вполне доступным студентам 1 курса магистратуры ЛФИ МФТИ, как теоретикам, так и экспериментаторам, специализирующимся по физике твердого тела.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- рассмотреть особенности явлений ЯМР в магнитоупорядоченных и парамагнитных веществах, металлах, жидкостях и твердых телах, а также освещено практическое применение методов ЯМР в химии, медицине и биологии.

Задачи дисциплины

- изучить особенности явлений ЯМР в магнитоупорядоченных и парамагнитных веществах, металлах, жидкостях и твердых телах, а также освещено практическое применение методов ЯМР в химии, медицине и биологии.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
	УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1 Умеет решать задачи собственного личностного и профессионального развития, определять и реализовывать приоритеты совершенствования собственной деятельности
	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость

на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- методы анализа структуры конденсированных сред с помощью ядерного магнитного резонанса.

уметь:

- пользоваться описаниями структуры кристаллов.

владеть:

- методами классификации структуры кристаллов.

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	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Основные положения теории. Основные методы ЯМР	8	8		15
2	ЯМР в магнитных структурах.	12	12		15
3	Ядерная магнитная релаксация. Многоимпульсная спектроскопия	10	10		15
Итого часов		30	30		45
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

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

Семестр: 1 (Осенний)

1. Основные положения теории. Основные методы ЯМР

Основные положения теории магнитного резонанса в парамагнитных спиновых системах. Феноменологическое описание движение намагниченности в постоянном и переменном магнитных полях. Стационарные решения уравнений Блоха в переменном поле. Стационарные и импульсные методы возбуждения сигналов парамагнитного резонанса. Признак существования сигналов эха. Примеры импульсных последовательностей обеспечивающих формирование сигналов эха. Основные принципы ЯМР эксперимента. Схемы измерения и аппаратура. Метод двойного резонанса. Сверхтонкое взаимодействие в твердых телах. Особенности ядерного магнитного резонанса в ферро- и антиферромагнетиках.

2. ЯМР в магнитных структурах.

Ядерный магнитный резонанс в магнетиках и металлах. Локальная магнитная восприимчивость и эффекты усиления. Особенности ЯМР в многодоменных магнетиках. Магнитоупорядоченные кристаллы: структуры, состояния и взаимодействия. Основное состояние антиферромагнетика. Определение нулевого сокращения спинов в магнитоупорядоченных кристаллах из данных ЯМР. Фазовые переходы в неколлинеарных антиферромагнетиках. Симметричное описание спектра частот ЯМР с магнитными структурами и состояниями.

3. Ядерная магнитная релаксация. Многоимпульсная спектроскопия

Ядерные спиновые волны, динамический сдвиг частоты и связанные с ним особенности ЯМР. Косвенное спин-спиновое взаимодействие. Химический сдвиг. Влияние зарядовой плотности на экранирование. Межмолекулярные взаимодействия – водородная связь и влияние растворителя. Изотопические эффекты. Механизмы ядерной релаксации: спин-решеточная, диполь-дипольная, квадрупольная, скалярная релаксации. Релаксация, связанная с анизотропией химического сдвига. Ядерная релаксация в металлах, найтовский сдвиг. Одномерная ЯМР спектроскопия последовательностью сложных импульсов. Двумерная ЯМР спектроскопия. Динамическая ЯМР спектроскопия.

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

Аудитория, библиотека.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Е. А. Туров, М. П. Петров, ЯМР в ферро – и антиферромагнетиках, М.: Наука, 1969.
2. М. И. Куркин, Е. А. Туров, ЯМР на магнитоупорядоченных веществах и его применение, М.: Наука, 1990.
3. Сверхтонкое взаимодействие в твердых телах (под ред. А. Д. Фримана и Р. Б. Френкеля) М.: Мир, 1970.

Дополнительная литература

1. Т. Фаррар, Э. Беккер, Импульсная и фурье-спектроскопия ЯМР, пер. с англ., М.: Мир, 1973.
2. H. Friebolin, Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, Wiley-vch, Verlag Gmbh & Co. KGaA, Weinheim, 2011.

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

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Не предусмотрено.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

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 и понятия, 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.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению: Прикладные математика и физика
профиль подготовки: Общая и прикладная физика
Физтех-школа физики и исследований им. Ландау
кафедра физики и техники низких температур
курс: 1
квалификация: магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен

Разработчик: А.М. Тихонов, д-р физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
	УК-2.2 Способен прогнозировать результат деятельности и планировать последовательность шагов для достижения данного результата. Формирует план-график реализации проекта в целом и план контроля его выполнения
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1 Умеет решать задачи собственного личностного и профессионального развития, определять и реализовывать приоритеты совершенствования собственной деятельности
	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности

изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Методы ядерного магнитного резонанса» обучающийся должен:

знать:

- методы анализа структуры конденсированных сред с помощью ядерного магнитного резонанса.

уметь:

- пользоваться описаниями структуры кристаллов.

владеть:

- методами классификации структуры кристаллов.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия или в конце занятия по пройденной теме.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

- Основные положения теории магнитного резонанса в парамагнитных спиновых системах.
- Феноменологическое описание движение намагниченности в постоянном и переменном магнитных полях. Стационарные решения уравнений Блоха в переменном поле.
- Стационарные и импульсные методы возбуждения сигналов парамагнитного резонанса. Признак существования сигналов эха. Примеры импульсных последовательностей обеспечивающих формирование сигналов эха.
- Основные принципы ЯМР эксперимента. Схемы измерения и аппаратура. Метод двойного резонанса.
- Сверхтонкое взаимодействие в твердых телах.
- Особенности ядерного магнитного резонанса в ферро- и антиферромагнетиках
- Ядерный магнитный резонанс в магнетиках и металлах.
- Локальная магнитная восприимчивость и эффекты усиления. Особенности ЯМР в многодоменных магнетиках
- Магнитоупорядоченные кристаллы: структуры, состояния и взаимодействия.
- Основное состояние антиферромагнетика. Определение нулевого сокращения спинов в магнитоупорядоченных кристаллах из данных ЯМР.
- Фазовые переходы в неколлинеарных антиферромагнетиках. Симметричное описание спектра частот ЯМР с магнитными структурами и состояниями.
- Ядерные спиновые волны, динамический сдвиг частоты и связанные с ним особенности ЯМР. Косвенное спин-спиновое взаимодействие.

- Химический сдвиг. Влияние зарядовой плотности на экранирование. Межмолекулярные взаимодействия – водородная связь и влияние растворителя. Изотопические эффекты.
- Механизмы ядерной релаксации: спин-решеточная, диполь-дипольная, квадрупольная, скалярная релаксации. Релаксация, связанная с анизотропией химического сдвига. Ядерная релаксация в металлах, найтовский сдвиг.
- Одномерная ЯМР спектроскопия последовательностью сложных импульсов.
- Двумерная ЯМР спектроскопия. Динамическая ЯМР спектроскопия.
- Использование ЯМР в медицине и биологии.

Примеры экзаменационных билетов:

Билет 1.

1. Основные принципы ЯМР эксперимента. Схемы измерения и аппаратура. Метод двойного резонанса.
2. Ядерные спиновые волны, динамический сдвиг частоты и связанные с ним особенности ЯМР. Косвенное спин-спиновое взаимодействие.

Билет 2.

1. Одномерная ЯМР спектроскопия последовательностью сложных импульсов.
2. Основные положения теории магнитного резонанса в парамагнитных спиновых системах.

Билет 3.

1. Сверхтонкое взаимодействие в твердых телах.
2. Фазовые переходы в неколлинеарных антиферромагнетиках. Симметричное описание спектра частот ЯМР с магнитными структурами и состояниями.

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 балла - 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 балла - 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 балла - 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 балл - 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. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.