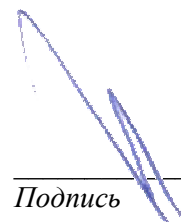


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский  
государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук

---



Подпись

СОГЛАСОВАНО

Декан ФЕН

Резников В. А.

5 октября 2020 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**ОСНОВЫ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА**

направление подготовки: 04.04.01 Химия

направленность (профиль): Химия

Форма обучения: очная

Разработчик:

к.х.н. Мельников А.Р.

Зав. каф. физической химии

академик РАН, проф., д.х.н. Пармон В.Н.

Руководитель программы:

чл.-корр. РАН, проф. Нетесов С.В.

Новосибирск, 2020

## Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы .....	4
3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося .....	5
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	5
5. Перечень учебной литературы .....	6
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся..	6
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины .....	6
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине .....	7
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине .....	7
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.....	7

**1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<p><b>М-ОПК-1.</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</p>	<p><b>М-ОПК-1.1.</b> Использует существующие и разрабатывает новые методы получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук</p>	<p>- <i>владеет</i> физическими основами магнитного резонанса                      - <i>демонстрирует</i> понимание устройства современных импульсных спектрометров ЭПР и ЯМР</p>
<p><b>М-ОПК-2.</b> Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p>	<p><b>М-ОПК-2.1.</b> Проводит критический анализ собственных экспериментальных («в стекле» и «in silico») данных, корректно интерпретирует их</p>	<p>- <i>владеет</i> теоретическими основами магнитного резонанса, включая современные импульсные методики                      - <i>способен</i> анализировать и интерпретировать экспериментальные данные в рамках существующих моделей и теорий</p>
	<p><b>М-ОПК-2.2.</b> Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p>	<p>- <i>владеет</i> навыками извлечения магнито-резонансных параметров из экспериментальных спектров                      - <i>имеет представление</i> о механизмах спиновой релаксации, природы СТВ, химического сдвига и т.д.</p>
<p><b>М-ПК-1.</b> Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук</p>	<p><b>М-ПК-1.2.</b> Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи в рамках НИР или НИОКР, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов</p>	<p>- <i>демонстрирует</i> понимание области применения различных экспериментальных методик магнитного резонанса                      - <i>выбирает</i> оптимальные модели</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		описания полученных экспериментальных данных
<b>М-ПК-4.</b> Способен использовать современные инструментальные методы для установления физических и физико-химических свойств известных и новых соединений и материалов	<b>М-ПК-4.1.</b> Исследует физические и физико-химические свойства (оптические, магнитные, электрические, каталитические, термические и т.п.) известных и новых соединений и материалов с применением современного научного оборудования и программного обеспечения	- <i>демонстрирует</i> знание различных экспериментальных методик магнитного резонанса - <i>выбирает</i> оптимальный метод исследования интересующей магнито-резонансной характеристики нового материала или соединения

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), изучение которых необходимо для освоения дисциплины «Основы магнитного резонанса»:

Дисциплина «Основы магнитного резонанса» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам изучения дисциплин «Строение вещества» и «Физика» в рамках бакалавриата или специалитета.

Дисциплины (практики), для изучения которых необходимо освоение дисциплины «Основы магнитного резонанса»:

В результате освоения дисциплины «Основы магнитного резонанса» студент освоит физические основы магнитного резонанса, включая современные импульсные методики. Полученные знания и навыки помогут в систематическом изучении курсов «Магнитная радиоспектроскопия», «Физические методы установления строения органических соединений» в рамках магистратуры, а также в рамках производственной практики и научно-исследовательской работы.

**3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося**

Трудоемкость дисциплины – 4 з.е. (144 ч)

Форма промежуточной аттестации: 2 семестр – экзамен

№	Вид деятельности	Семестр
		2
1	Лекции, ч	30
2	Практические занятия, ч	30
3	Лабораторные занятия, ч	-
4	Занятия в контактной форме, ч, из них	65
5	аудиторных занятий, ч	60
6	в электронной форме, ч	-
7	консультаций, ч.	1
8	промежуточная аттестация, ч	4
9	Самостоятельная работа, ч.	79
10	Всего, ч	144

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

*2 семестр*

Лекции (30 ч)

Наименование темы и их содержание	Объем, Час
Раздел 1. Основы магнитного резонанса	
1. Основные понятия магнитного резонанса	2
2. ЭПР в жидкости	2
3. ЯМР в жидкости	2
4. ЭПР в твердых телах	2
5. ЭПР триплетных состояний	1
6. ЯМР в твердых телах	2
Раздел 2. Спиновая динамика	
1. Спиновая динамика. Уравнения Блоха	3
2. Спиновая релаксация	3
3. Двойной резонанс	2
4. Химическая поляризация ядер и электронов	2
Раздел 3. Импульсные методы в магнитном резонансе	
1. Свободная индукция и спиновое эхо	4
2. Импульсная Фурье-спектроскопия	3
3. Двумерная Фурье-спектроскопия	2

### Практические занятия (30 ч)

Содержание практического занятия	Объем, Час
Раздел 1. Основы магнитного резонанса	
1. Семинар по основным понятиям магнитного резонанса	2
2. Решение задач на ЭПР в жидкости	2
3. Решение задач на ЯМР в жидкости	2
4. Решение задач на ЭПР в твердых телах	2
5. Семинар по ЭПР триплетных состояний	1
6. Семинар по ЯМР в твердых телах	2
Раздел 2. Спиновая динамика	
1. Семинар по уравнениям Блоха	4
2. Семинар по спиновой релаксации	2
3. Решение задач на метод двойного резонанса	2
Раздел 3. Импульсные методы в магнитном резонансе	
1. Семинар по методу спинового эха	4
2. Семинар по методам импульсной Фурье-спектроскопии	4
3. Семинар по методам двумерной Фурье-спектроскопии	3

### Самостоятельная работа студентов (79 ч)

Перечень занятий на СРС	Объем, Час
Подготовка к практическим занятиям	20
Выполнение домашнего задания	22
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	12
Подготовка к промежуточной контрольной работе	10
Подготовка к экзамену	15

### 5. Перечень учебной литературы

1. Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса. НГУ, Новосибирск: Редакционно-издательский центр НГУ, 2010, 293 с. Библиотека НГУ 30 экз.
2. Сликтер Ч.П. Основы теории магнитного резонанса. Мир, 1981, 448 с. Библиотека НГУ 2 экз.
3. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. Мир, 1990, 709 с. Библиотека НГУ 2 экз.

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

4. Вертц Дж., Болтон Дж. Теория и практические приложения метода ЭПР. Мир, 1975, 548 с. Библиотека НГУ 9 экз.

### 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

#### 7.1 Ресурсы сети Интернет

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);

- образовательные интернет-порталы;  
Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС, электронную почту, социальные сети.

### ***7.2 Современные профессиональные базы данных:***

Не используются

## **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

### ***8.1 Перечень программного обеспечения***

Windows, Microsoft Office, Python 3.

### ***8.2 Информационные справочные системы***

Не используются.

## **9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Для реализации дисциплины «Основы магнитного резонанса» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, 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**

Перечень результатов обучения по дисциплине «Основы магнитного резонанса» и индикаторов их достижения представлен в разделе 1.

### ***10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине***

#### ***Текущий контроль успеваемости:***

В течение семестра студенты выполняют одну контрольную работу в середине курса, которая нацелена на текущую оценку уровня освоения изучаемого материала. Кроме того, преподаватель оценивает уровень подготовки студента к каждому семинарскому занятию

путем обсуждения тем, рассматриваемых в рамках практического занятия. В рамках освоения курса студенты выполняют домашние работы к практическим занятиям, выполнение которых обсуждается на следующем занятии.

**Промежуточная аттестация:**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме устного экзамена. Необходимым условием допуска к экзамену является получение положительной («удовлетворительно», «хорошо», «отлично») за контрольную работу, проводимую в середине курса.

**Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Основы магнитного резонанса»**

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочное средство
<b>М-ОПК-1.</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	<b>М-ОПК-1.1.</b> Использует существующие и разрабатывает новые методы получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук	- <i>владеет</i> физическими основами магнитного резонанса - <i>демонстрирует</i> понимание устройства современных импульсных спектрометров ЭПР и ЯМР	Письменная контрольная работа Экзамен
<b>М-ОПК-2.</b> Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	<b>М-ОПК-2.1.</b> Проводит критический анализ собственных экспериментальных («в стекле» и «in silico») данных, корректно интерпретирует их	- <i>владеет</i> теоретическими основами магнитного резонанса, включая современные импульсные методики - <i>способен</i> анализировать и интерпретировать экспериментальные данные в рамках существующих моделей и теорий	Письменная контрольная работа Экзамен



	<b>М-ОПК-2.2.</b> Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	- <i>владеет</i> навыками извлечения магнито-резонансных параметров из экспериментальных спектров - <i>имеет представление</i> о механизмах спиновой релаксации, природы СТВ, химического сдвига и т.д.	
<b>М-ПК-1.</b> Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	<b>М-ПК-1.2.</b> Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи в рамках НИР или НИОКР, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	- <i>демонстрирует</i> понимание области применения различных методик магнитного резонанса - <i>выбирает</i> оптимальные модели описания полученных экспериментальных данных	Письменная контрольная работа Экзамен
<b>М-ПК-4.</b> Способен использовать современные инструментальные методы для установления физических и физико-химических свойств известных и новых соединений и материалов	<b>М-ПК-4.1.</b> Исследует физические и физико-химические свойства (оптические, магнитные, электрические, каталитические, термические и т. п.) известных и новых соединений и материалов с применением современного научного оборудования и программного обеспечения	- <i>демонстрирует</i> знание различных экспериментальных методик магнитного резонанса - <i>выбирает</i> оптимальный метод исследования интересующей магнито-резонансной характеристики нового материала или соединения	Письменная контрольная работа Экзамен

Таблица 10.2

<b>Критерии оценивания результатов обучения</b>	<b>Шкала оценивания</b>
<p><b><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></b> – верное решение задач и корректное описание теоретического материала – точность ответа, отсутствие ошибок</p> <p><b><u>Экзамен:</u></b> – правильная формулировка используемых понятий и теорий, их описание в контексте рассматриваемого вопроса</p>	<i>Отлично</i>

<ul style="list-style-type: none"> <li>– самостоятельность ответа, умение анализировать и делать собственные выводы по рассматриваемой теме, интерпретировать полученные результаты</li> <li>– уверенное владение теоретическим и фактическим материалом, подкрепленным ссылками на научную литературу и источники</li> <li>– наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы.</li> <li>– корректное решение предложенной практической задачи, корректная интерпретация ответа</li> </ul> <p>При изложении ответа на вопрос(ы) экзаменационного билета обучающийся мог допустить непринципиальные неточности</p>	
<p><b><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– верное решение и корректное описание двух из трех предложенных вопросов</li> <li>– не менее 70% ответов должны быть правильными</li> </ul> <p><b><u>Экзамен:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– корректная формулировка используемых понятий и теорий, их частичное описание в контексте рассматриваемого вопроса</li> <li>– самостоятельность ответа, умение анализировать и делать собственные выводы по рассматриваемой теме, наличие затруднений в интерпретации полученных результатов</li> <li>– владение теоретическим и фактическим материалом при наличии незначительных ошибок</li> <li>– корректный ход решения предложенной практической задачи</li> </ul>	<i>Хорошо</i>
<p><b><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– верное решение и корректное описание одного из трех предложенных вопросов</li> <li>– не менее 40% ответов должны быть правильными</li> </ul> <p><b><u>Экзамен:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– наличие затруднений при формулировке используемых понятий и теорий, их частичное описание в контексте рассматриваемого вопроса при наличии ошибок</li> <li>– самостоятельность ответа, который в слабой степени подкреплен умением анализировать и делать собственные выводы по рассматриваемой теме, наличие принципиальных затруднений в интерпретации полученных результатов</li> <li>– слабое владение теоретическим и фактическим материалом</li> <li>– наличие начальной идеи решения предложенной практической задачи</li> </ul>	<i>Удовлетворительно</i>
<p><b><u>Письменная контрольная (тестовая) работа:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– присутствие многочисленных ошибок (все предложенные задачи и вопросы содержат ошибки)</li> </ul> <p><b><u>Экзамен:</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности при формулировке используемых понятий и теорий, их фрагментарное описание в контексте рассматриваемого вопроса</li> <li>– грубые ошибки в применении терминов и понятий</li> <li>– слабое владение теоретическим и фактическим материалом</li> <li>– отсутствие решения предложенной практической задачи</li> </ul>	<i>Неудовлетворительно</i>

**Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения**

**Примеры промежуточной контрольной работы:**

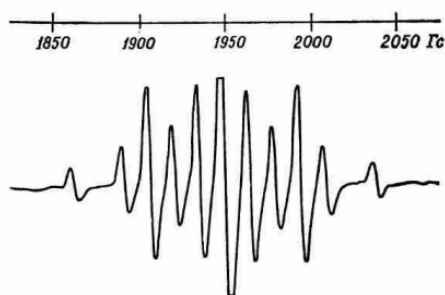
**Пример 1**

1. Уровни энергии радикала с одним ядром, правила отбора, ЭПР спектр.  
2. На рисунке 4-41 показан спектр ЭПР облученного монокристалла KCl, содержащего изотоп  $^{33}\text{S}$  ( $I = 3/2$ ). Кристалл приготовлен из серы, обогащенной  $^{33}\text{S}$  до 60%. Спектр приписывается аниону  $\text{S}_2^-$ .

(а) Каковы все возможные разновидности ионов  $\text{S}_2^-$ , каково их относительное содержание в образце?

(б) Какое максимальное число линий можно ожидать для каждой изотопной формы  $\text{S}_2^-$ ?

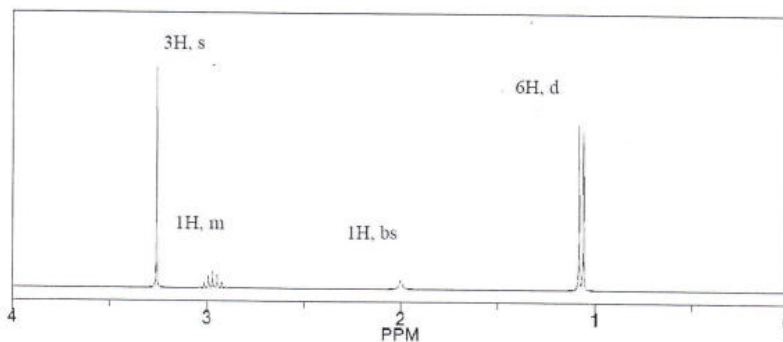
(в) Определите константу СТВ на  $^{33}\text{S}$ , используя приведенный спектр. Центральная линия обрезана по оси ординат.



Р и с. 4-41. Спектр иона  $\text{S}_2^-$  в  $\gamma$ -облученном монокристалле KCl, легированном  $^{33}\text{S}$  (60%) при 9,550 ГГц [56].

3. По приведенному спектру  $^1\text{H}$  ЯМР для  $\text{C}_4\text{H}_{11}\text{N}$  определите строение молекулы. Нарисуйте спектры  $^{13}\text{C}$  ЯМР и  $^{15}\text{N}$  ЯМР.

Molecular formula =  $\text{C}_4\text{H}_{11}\text{N}$  IR: 3182, 2967  $\text{cm}^{-1}$



**Пример 2**

1. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие. Системы  $\text{A}_n\text{X}_m$ , AB.

2. (а) Можно ли оценить величину  $a^D$  в свободном радикале, если известна константа  $a^H$  для недеитерированного радикала? Считать, что кроме дейтерирования никаких других изменений в радикале не происходит.

(б) На рисунке 4-37 показан спектр смеси радикалов  $\bullet\text{CH}_2\text{D}$  и  $\bullet\text{CD}_2\text{H}$ . Идентифицируйте линии, принадлежащие каждому из радикалов, и определите константы сверхтонкого расщепления для каждого из радикалов. Оцените отношение концентраций радикалов  $\bullet\text{CH}_2\text{D}$  и  $\bullet\text{CD}_2\text{H}$  в смеси.

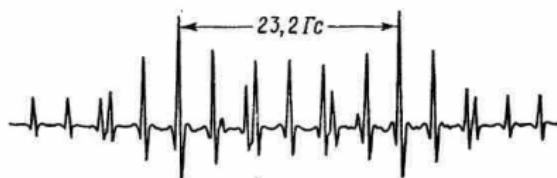


Рис. 4-37. Вторая производная ЭПР-поглощения смеси  $\dot{\text{C}}\text{HD}_2$  и  $\dot{\text{C}}\text{H}_2\text{D}$  [53].

3. Изобразите схематически друг над другом  $^1\text{H}$  ЯМР спектры соединений:  $\text{C}_2\text{H}_5\text{F}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{CH}_3$ . Объясните изменение в положениях резонанса метиленовых ( $-\text{CH}_2-$ ) и метильных ( $-\text{CH}_3$ ) протонов.

#### Примерные вопросы к экзамену:

1. Уровни энергии спина в магнитном поле. Условия резонанса. Макроскопическая намагниченность. Уравнения для населенностей в двухуровневой системе. Спин-решеточная релаксация. Насыщение.

2. Уровни энергии радикала с одним ядром, правила отбора, ЭПР спектр. С-Н фрагмент. СТВ с  $\beta$  протонами, сверхсопряжение.

3. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие. Системы  $A_nX_m$ , АВ. Отсутствие спин-спинового взаимодействия для эквивалентных спинов. Основные правила построения и расшифровки спектров  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР.

4. Магнитное электрон-ядерное диполь-дипольное взаимодействие. Система с одним ядром. Сателлиты. ЭПР ионов переходных металлов. Спин-орбитальное взаимодействие. Расщепление в нулевом поле.

5. Органические молекулы в триплетном состоянии. Гамильтониан триплетного состояния.

6. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие ядер. Гамильтониан в сферических координатах. Уровни энергии и спектр ЯМР системы из двух эквивалентных спинов. Форма линии в полиориентированной системе.

7. Продольная и перпендикулярная намагниченности. Уравнения Блоха. Вращающаяся система координат. Эффективное поле. Решение уравнений Блоха.

8. Эффекты обмена в спектрах магнитного резонанса. Медленный и быстрый обмены.

9. Спин-решеточная релаксация. Прямой процесс релаксации. Рамановский процесс релаксации. Процесс Орбаха-Аминова. Поперечная релаксация. Адиабатический и неадиабатический вклады. Однородная и неоднородная ширины линий.

10. Двойной резонанс. Эффект Оверхаузера. Двойной электронно-ядерный резонанс.

11. Радикальная пара, уровни энергии, возникновение ХПЭ. Кинетика синглет-триплетных переходов в радикальной паре, возникновение ХПЯ.

12. Спад свободной индукции. Преобразование Фурье. Спиновое эхо. Последовательность Хана. Времена спин-спиновой и спин-решеточной релаксации.

13. Угол поворота и условие полного возбуждения спектра. Линейный отклик. Соответствие стационарных и Фурье-спектров.

14. Двумерное разделение химических сдвигов и скалярных взаимодействий. Корреляционная спектроскопия.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации (приложение 2), предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

