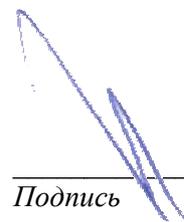


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

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>М-ОПК-1. 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>М-ОПК-1.1. 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>М-ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p> | <p>М-ОПК-2.1. 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>М-ОПК-2.2. 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>М-ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук</p> | <p>М-ПК-1.2. 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 |
| М-ПК-4. Способен использовать современные инструментальные методы для установления физических и физико-химических свойств известных и новых соединений и материалов | М-ПК-4.1. 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 |
|--|--|--|--|
| М-ОПК-1. 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 | М-ОПК-1.1. 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 |
| М-ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и теоретических работ в избранной области химии или смежных наук | М-ОПК-2.1. 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 |

| | | | |
|---|--|--|--|
| | М-ОПК-2.2. 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. | |
| М-ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках | М-ПК-1.2. 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 |
| М-ПК-4. Способен использовать современные инструментальные методы для установления физических и физико-химических свойств известных и новых соединений и материалов | М-ПК-4.1. 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

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

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

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

Примеры промежуточной контрольной работы:

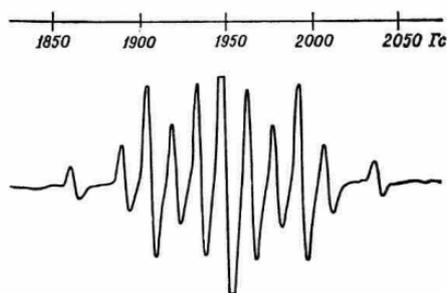
Пример 1

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}S ($I = 3/2$). Кристалл приготовлен из серы, обогащенной ^{33}S до 60%. Спектр приписывается аниону S_2^- .

(а) Каковы все возможные разновидности ионов S_2^- , каково их относительное содержание в образце?

(б) Какое максимальное число линий можно ожидать для каждой изотопной формы S_2^- ?

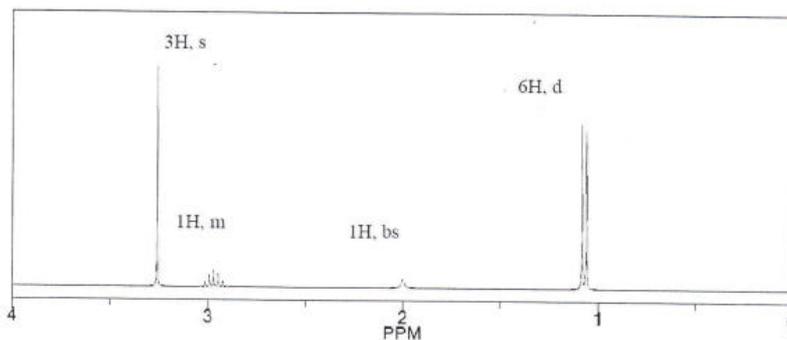
(в) Определите константу СТВ на ^{33}S , используя приведенный спектр. Центральная линия обрезана по оси ординат.



Р и с. 4-41. Спектр иона S_2^- в γ -облученном монокристалле KCl, легированном ^{33}S (60%) при 9,550 ГГц [56].

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

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



Пример 2

1. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие. Системы A_nX_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 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.

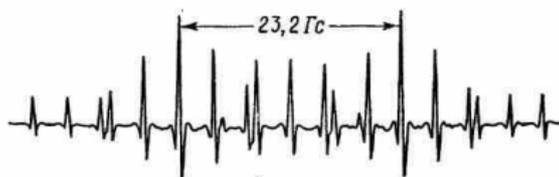


Рис. 4-37. Вторая производная ЭПР-поглощения смеси $\dot{\text{C}}\text{HD}_2$ и $\dot{\text{C}}\text{H}_2\text{D}$ [53].

3. Изобразите схематически друг над другом ^1H 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 β 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 ^1H и ^{13}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.

