

Приложение к приказу первого проректора
по учебной и научной работе

от _____ № _____

**Правительство Российской Федерации
Санкт-Петербургский государственный университет**

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Теория спектров ядерного магнитного резонанса
Theory of Nuclear Magnetic Resonance Spectra

Язык(и) обучения

русский

Трудоемкость в зачетных единицах: 3

Регистрационный номер рабочей программы: 003016

Санкт-Петербург
2014

Раздел 1. Характеристики учебных занятий

1.1. Цели и задачи учебных занятий

Целью курса является изучение учащимися основных разделов теории спектров ЯМР; развитие у учащихся навыков самостоятельного применения методов квантовой механики для расчетов одномерных спектров ЯМР; обеспечение базы для усвоения теории и практики двумерной спектроскопии ЯМР.

Основная задача курса — обучение студентов методам вычисления и интерпретации одномерных спектров ядерного магнитного резонанса в жидкостях; формирование у студентов понимания происхождения спектральных характеристик ядерного магнитного резонанса и их взаимосвязи с типами взаимодействий и величинами энергии магнитных взаимодействий в веществе.

1.2. Требования подготовленности обучающегося к освоению содержания учебных занятий (пререквизиты)

Для успешного освоения программы дисциплины студенты должны прослушать курсы «Квантовая механика» в объеме бакалавриата по направлениям «Физика» или «Прикладная математика и физика».

1.3. Перечень результатов обучения (learning outcomes)

В результате освоения дисциплины студенты должны:

- знать классификацию спектров ЯМР и иметь навыки классификации одномерных экспериментальных спектров;
- знать и уметь применять аналитические методики вычисления спектров ЯМР простых спиновых систем;
- знать и уметь применять численные методы расчётов спектров ЯМР многоспиновых систем с использованием современного программного обеспечения.

1.4. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий

Семинары – 15 часов, предэкзаменационная консультация 2 часа, экзамен 2 часа

Раздел 2. Организация, структура и содержание учебных занятий

2.1. Организация учебных занятий

2.1.1 профиль Магнитный резонанс. Физические аспекты и приложения

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся																		
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Контактная работа обучающихся с преподавателем											Самостоятельная работа			Объём активных и интерактивных форм учебных занятий	Трудоёмкость		
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	итоговая аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	сам. раб. с использованием методических материалов	текущий контроль (сам.раб.)			промежуточная аттестация (сам.раб.)	итоговая аттестация (сам.раб.)
ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ																		
очная форма обучения																		
Семестр 1	30	15	2						2				5		23		19	3
	2-100	10-25	2-100						2-100				1-1		1-1			
ИТОГО	30	15	2						2				5		23		3	

Виды, формы и сроки текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации						
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Формы текущего контроля успеваемости		Виды промежуточной аттестации		Виды итоговой аттестации (только для программ итоговой аттестации и дополнительных образовательных программ)	
	Формы	Сроки	Виды	Сроки	Виды	Сроки
ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ						
очная форма обучения						
Семестр 1			экзамен, устно, традиционная форма	по графику промежуточной аттестации		

2.1.2 профиль Экспериментальная физика

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся																		
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Контактная работа обучающихся с преподавателем											Самостоятельная работа					Объём активных и интерактивных форм учебных занятий	Трудоёмкость
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	итоговая аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	сам. раб. с использованием методических материалов	текущий контроль (сам.раб.)	промежуточная аттестация (сам.раб.)	итоговая аттестация (сам.раб.)		
ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ																		
очная форма обучения																		
Семестр 1	30	15	2					2				5		23		19	3	
	2-100	10-25	2-100					2-100				1-1		1-1				
ИТОГО	30	15	2					2				5		23			3	

Виды, формы и сроки текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации						
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Формы текущего контроля успеваемости		Виды промежуточной аттестации		Виды итоговой аттестации (только для программ итоговой аттестации и дополнительных образовательных программ)	
	Формы	Сроки	Виды	Сроки	Виды	Сроки
ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ						
очная форма обучения						
Семестр 1			экзамен, устно, традиционная форма	по графику промежуточной аттестации		

2.2. Структура и содержание учебных занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела, части)	Вид учебных занятий	Количество часов
0	Введение	Лекции	2
		семинары	1
1	Спиновый гамильтониан и методы расчёта спектров ЯМР	Лекции	10
		семинары	6
		по методическим материалам	2
2	Спектры ЯМР изотропных жидкостей	Лекции	10
		семинары	6
		по методическим материалам	2
3	Спектры ЯМР ориентированных систем	Лекции	8
		семинары	2
		по методическим материалам	1
4	Экзамен	консультации	2
		Пром. аттестация (аудитор.)	2
		Сам.раб. (пром. аттестация)	23

Раздел 0. Введение (лекции – 2 часа, семинары – 1 час)

0.1. Прямая и обратная задачи спектроскопии ЯМР.

Расчет спектров ЯМР; определение структуры молекул по спектрам ЯМР.

Семинар: освоение работы с программами обработки экспериментальных одномерных спектров ЯМР.

Раздел 1. Спиновый гамильтониан и методы расчёта спектров ЯМР (лекции – 10 часов, семинары – 6 часов)

1.1. Основы квантовомеханического расчёта спектров ЯМР.

Векторы и операторы в гильбертовом пространстве. Введение используемых терминов и обозначений: нотация Дирака, свойства операторов в гильбертовом пространстве, коммутативность операторов, собственные числа и собственные векторы операторов. Оператор спина и его проекции на оси координат. Собственные векторы оператора I_z для одно- и многоспиновых систем. Матрицы операторов проекций спина для спина $I=1/2$, для спина $I>1/2$, для многоспиновых систем. Мультипликативные базисные функции.

1.2. Гамильтониан магнитных взаимодействий и расчёт спектров ЯМР.

Гамильтонианы многоспиновых систем: зеемановский, электронного экранирования, косвенных спин-спиновых, прямых магнитных диполь-дипольных, квадрупольных взаимодействий. Оценка их величины. Блочная структура матрицы гамильтониана. Размер подматриц. Расчёт собственных чисел и собственных векторов блочной матрицы. Численные методы расчёта. Вероятности переходов под действием слабого гармонического возмущения. Учёт реальной формы спектральной линии. Интенсивность и амплитуда спектра ЯМР.

1.3. Структура и подвижность молекул.

Влияние подвижности молекул на вид спинового гамильтониана. Пространственная структура молекул. Ориентация молекул по отношению к магнитному полю.

Конформационная подвижность. Молекулярная подвижность. Усреднение гамильтониана магнитных взаимодействий.

Семинары: выполнение расчётов матриц гамильтонианов, построение базисных векторов многоспиновых систем, выполнение аналитических расчётов собственных векторов и собственных чисел матриц гамильтонианов.

Раздел 2. Спектры ЯМР изотропных жидкостей (лекции – 10 часов, семинары – 6 часов)

2.1. Особенности магнитных взаимодействий в жидкостях.

Иерархия гамильтонианов. Магнитно-эквивалентные и неэквивалентные ядра.

Обозначение (классификация) спектров.

2.2. Спектры систем с группами магнитно-эквивалентных ядер.

Спектр A_p системы p эквивалентных ядер. Расчёт спектров первого порядка ($A_p X_q$). Расчёт спектров двух- и трехспиновых ($I=1/2$) систем AB , ABX .

2.3. Использование симметрии молекулы при расчёте спектров.

Мультипликативный базис и базис симметрии. Структура матрицы гамильтониана в базисе симметрии. Разрешенные и запрещенные переходы. Примеры расчета спектров двух- и трехспиновых систем с использованием базисов симметрии.

2.4. Применение численных методов для расчёта спектров.

Представление мультипликативных базисных функций для системы спинов $I=1/2$ в виде целых двоичных чисел. Операции с целыми числами. Вычисление элементов матрицы гамильтониана. Численные методы диагонализации матриц.

Семинары: анализ экспериментальных спектров ЯМР жидкостей, предоставленных преподавателем, с помощью современного программного обеспечения, определение параметров магнитных взаимодействий спинов, выяснение структуры молекул.

Раздел 3. Спектры ЯМР ориентированных систем (лекции – 8 часов, семинары – 2 часа)

3.1. Особенности магнитных взаимодействий в ориентированных системах.

Молекулярная структура и подвижность в веществах, находящихся в твёрдом и жидкокристаллическом состояниях. Параметры ориентационного порядка жидких кристаллов. Иерархия гамильтонианов магнитных взаимодействий.

3.2. Спектры молекул, ориентированных в жидких кристаллах.

Особенности усреднения энергии диполь-дипольных и квадрупольных взаимодействий.

Формулы для энергии диполь-дипольных и квадрупольных взаимодействий. Расчёт спектров ЯМР и определение молекулярной структуры веществ.

3.3. Вычисление спектров ЯМР систем с гамильтонианом диполь-дипольных взаимодействий.

Спектры ЯМР, обусловленные диполь-дипольными взаимодействиями. Вид спектров.

Точный расчет спектров на примере двухспиновых систем. Методы приближённого расчёта спектров многоспиновых систем.

Семинары: решение задач по вычислению спектров ЯМР систем с диполь-дипольными взаимодействиями аналитическими и численными методами.

Раздел 3. Обеспечение учебных занятий

3.1. Методическое обеспечение

3.1.1 Методические указания по освоению дисциплины

Для успешного освоения дисциплины студенты должны посещать лекционные занятия и конспектировать лекции, выполнять более 75% заданий на семинарах. Перед занятиями студентам рекомендуется прочитать конспект предыдущей лекции и ознакомиться с темой предстоящей лекции (по п. 2.2 данной программы дисциплины). В конце лекции студенты могут задать лектору уточняющие вопросы по изложенной теме.

3.1.2 Методическое обеспечение самостоятельной работы

Для самостоятельной работы студенты должны использовать специализированное издание «Теория спектров ЯМР», методические материалы и указания, расположенные на сайте преподавателя. Не рекомендуется использовать материалы из Интернет-ресурса wikipedia.org.

3.1.3 Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания

Промежуточная аттестация проводится в виде устного экзамена в традиционной (устной) форме. В билете содержится 2 вопроса. На подготовку к ответу студенту даётся не менее 40 минут, но не более 60 минут. Студент готовит конспект ответа, содержащий основные формулы, математические выкладки, иллюстрации, графики. Во время ответа студент должен связно изложить и раскрыть тему каждого из вопросов. Во время ответа преподаватель может задать уточняющие вопросы по теме вопроса. После ответа на основные вопросы билета, преподаватель вправе задать дополнительные вопросы по любой теме из списка вопросов, вынесенных на экзамен. В качестве дополнительных используются вопросы, не требующие длительного вывода и трудоемких вычислений, в том числе на знание определений, основных формул, основных графиков.

Критерии выставления оценок за экзамен.

Оценка «отлично» выставляется, если выполняются оба условия:

1. обучающимся даны полные исчерпывающие ответы по всем вопросам билета, обучающийся свободно ориентируется в материале;
2. обучающийся отвечает на все дополнительные вопросы.

Оценка «хорошо» выставляется, если выполняются оба условия

1. обучающимся дан полный ответ на первый вопрос билета, по второму вопросу написаны основные определения, формулы и графики (в случае наличия);
2. обучающийся отвечает более чем на половину дополнительных вопросов.

Оценка «удовлетворительно» выставляется, если выполняются оба условия

1. обучающимся даны основные определения, формулы и графики (в случае наличия) при ответе на каждый вопрос;
2. обучающийся дает правильный ответ более чем на треть заданных дополнительных вопросов.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется, если не выполняются условия для получения оценок «отлично», «хорошо» и «удовлетворительно».

3.1.4 Методические материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы, оценочные средства)

Примерный список тем, выносимых на экзамен:

- 1) Оператор спина и его проекции, Гильбертово пространство, многоспиновые системы.
- 2) Вычисление спектра системы АВ. Предельные случаи А2 и АХ.
- 3) Матричное представление операторов, матрицы Паули, матрицы проекций оператора спина для $l > 1/2$.
- 4) Магнитная эквивалентность ядер. Обозначения спектров ЯМР в жидкостях
- 5) Базисные функции симметрии, примеры построения матриц гамильтонанов.
- 6) Вычисление спектра двухспиновой системы в твердом теле. Случай разных спинов.
- 7) Спектр системы Ар. Вычисление спектров первого порядка АрХq.
- 8) Функция формы линии, последовательность действий (алгоритм) для вычисления спектров
- 9) Спектры жидких кристаллов и ориентированных молекул.
- 10) Мультипликативные базисные функции, матрицы гамильтонианов магнитных взаимодействий
- 11) Вычисление спектра двухспиновой системы в твердом теле. Случай одинаковых спинов.

3.1.5 Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса

3.2. Кадровое обеспечение

3.2.1 Образование и (или) квалификация штатных преподавателей и иных лиц, допущенных к проведению учебных занятий

К чтению лекций должны привлекаться преподаватели, имеющие ученую степень кандидата или доктора физико-математических наук, проводящие научную работу в области магнитного резонанса и имеющие научные публикации по теме спектроскопии магнитного резонанса.

Для проведения семинаров должны привлекаться лекторы данного курса или другие преподаватели, имеющие квалификацию в области физики или прикладных математики и физики, проводящие научную работу в области магнитного резонанса и имеющие научные публикации по теме спектроскопии магнитного резонанса.

3.2.2 Обеспечение учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом

Для проведения семинаров в компьютерном классе необходимы учебно-вспомогательный персонал (системные администраторы ЭВМ), обеспечивающие работу дисплейного класса в часы занятий.

3.3. Материально-техническое обеспечение

3.3.1 Характеристики аудиторий (помещений, мест) для проведения занятий

Стандартная лекционная аудитория.

Компьютерный класс для проведения семинарских занятий.

3.3.2 Характеристики аудиторного оборудования, в том числе неспециализированного компьютерного оборудования и программного обеспечения общего пользования

В лекционной аудитории: компьютерный видеопроектор, компьютер (стационарный или переносной) с ОС Windows или Linux и программой показа презентаций MS PowerPoint или Adobe Acrobat, подключенный к видеопроектору, экран, доска для письма маркерами или мелом, маркеры или мел цветные (4 цвета).

Компьютерный класс, в котором установлено и работает специализированное ПО, указанное в пункте 3.3.4; компьютеры должны удовлетворять минимальным требованиям, установленным разработчиками ПО (проверяется системными администраторами дисплейного класса при установке ПО); для каждого студента одно рабочее место; возможность чтения файлов с внешнего носителя (USB-флеш карты). Дополнительное оборудование – доска, маркеры или мел.

3.3.3 Характеристики специализированного оборудования

Специальное оборудование не требуется.

3.3.4 Характеристики специализированного программного обеспечения

Специализированное ПО – один из пакетов программ обработки спектров ЯМР: ACD/Labs, MNova NMR или Bruker TopSpin. Лицензия должна позволять работать до 10 студентам одновременно.

3.3.5 Перечень и объёмы требуемых расходных материалов

- 1) Цветные мелки или цветные маркеры для доски (в соответствии с оборудованием лекционной аудитории и компьютерного класса), комплект 4 цвета, один комплект в семестр.
- 2) Бумага белая А4 для проведения экзамена – 50 листов в семестр.

3.4. Информационное обеспечение

3.4.1 Список обязательной литературы

1. А. В. Комолкин, А. В. Егоров. Теория спектров ЯМР: учеб.-метод. пособие. – СПб: изд-во СПбГУ, 2013. – 52 с.
2. Квантовая радиофизика: магнитный резонанс и его приложения. Учеб. пособие, 2-е изд. / под ред. проф. В. И. Чижика – СПб: изд-во СПбГУ, 2009. – 700 с.

3.4.2 Список дополнительной литературы

1. А. В. Комолкин. ЯМР 1H и 2H жидких кристаллов: интерпретация спектров. Диссертация к. ф.-м. н. — Ленинград, 1990.
2. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Вокаун. ЯМР в одном и двух измерениях: Пер. с англ. — М.: Мир, 1990.
3. М. Goldman. Quantum Description of High-Resolution NMR in Liquids. — N.-Y.: Oxford University Press, 1988.
4. С. L. Khetrapal, А. С. Kunwar. NMR studies of molecules oriented in thermotropic liquid crystals. / In book: Advances in Magnetic Resonance. Vol. 9. — N.-Y., 1977, p.p. 301-422.
5. С. Чандрасекар. Жидкие кристаллы. — М.: Мир, 1980.
6. Г. Браун, Дж. Уокен. Жидкие кристаллы и биологические структуры. — М.: Мир, 1982.

3.4.3 Перечень иных информационных источников

- 1) <http://nmr.phys.spbu.ru/~komolkin/spectra-5k/>

Раздел 4. Разработчики программы

Андрей Владимирович Комолкин, канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры ядерно-физических методов исследования СПбГУ