

Приложение к приказу первого проректора  
по учебной и научной работе

от \_\_\_\_\_ № \_\_\_\_\_

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

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА  
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Ядерный магнитный резонанс в ориентированных средах  
Nuclear magnetic resonance in oriented media

**Язык(и) обучения**

русский

Трудоемкость в зачетных единицах: 2

Регистрационный номер рабочей программы: XXXXXX

Санкт-Петербург  
2014

## **Раздел 1. Характеристики учебных занятий**

### **1.1. Цели и задачи учебных занятий**

Целью курса является изучение учащимися основных особенностей спектров ЯМР в жидких кристаллах; развитие у учащихся навыков самостоятельного применения методов ЯМР для изучения жидких кристаллов; обеспечение базы для усвоения теории и практики двумерной спектроскопии ЯМР.

Основная задача курса — обучение студентов методам интерпретации одномерных спектров ядерного магнитного резонанса в жидких кристаллах; формирование у студентов понимания происхождения спектральных характеристик ЯМР в жидких кристаллах и их взаимосвязи с упорядоченностью жидких кристаллов.

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

Для успешного освоения программы дисциплины студенты должны прослушать курсы «Теория спектров ЯМР» и «Импульсные методы ЯМР в твёрдых телах» в объёме магистратуры по данным профилям.

### **1.3. Перечень результатов обучения (learning outcomes)**

В результате освоения дисциплины студенты должны:

- знать особенности спектров ЯМР в жидких кристаллах;
- знать и уметь применять методики обработки и интерпретации спектров ЯМР в жидких кристаллах;
- 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 – 14 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.)
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>																		
<b>очная форма обучения</b>																		
Семестр 3	14	14	2						2				8		23			2
	2-100	10-25	2-100						2-100				1-1		1-1			
<b>ИТОГО</b>	<b>30</b>	<b>15</b>	<b>2</b>						<b>2</b>				<b>8</b>		<b>23</b>			<b>2</b>

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
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>						
<b>очная форма обучения</b>						
Семестр 3			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.)		
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>																		
<b>очная форма обучения</b>																		
Семестр 3	14	14	2					2				8		23			2	
	2-100	10-25	2-100					2-100				1-1		1-1				
<b>ИТОГО</b>	<b>30</b>	<b>15</b>	<b>2</b>					<b>2</b>				<b>8</b>		<b>23</b>			<b>2</b>	

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
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>						
<b>очная форма обучения</b>						
Семестр 3			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: жидкие кристаллы	Лекции	3
		семинары	2
1	Спиновый гамильтониан в жидких кристаллах	Лекции	5
		семинары	6
		по методическим материалам	4
2	Спектры ЯМР жидких кристаллов	Лекции	6
		семинары	6
		по методическим материалам	4
4	Экзамен	консультации	2
		Пром. аттестация (аудитор.)	2
		Сам.раб. (пром. аттестация)	23

Раздел 0. Введение: жидкие кристаллы (лекции – 3 часа, семинары – 2 часа)

Лекции: Молекулярная структура жидких кристаллов, особенности упорядочения жидких кристаллов, их свойства, подготовка образцов для экспериментов по ЯМР.

Пространственная структура молекул. Ориентация молекул по отношению к магнитному полю. Конформационная подвижность. Молекулярная подвижность.

Семинар: освоение работы с программами обработки экспериментальных спектров ЯМР.

Раздел 1. Спиновый гамильтониан в жидких кристаллах (лекции – 5 часов, семинары – 6 часов)

Лекции: Гамильтониан магнитных взаимодействий и его связь с молекулярной структурой жидких кристаллов. Гамильтонианы многоспиновых систем: зеемановский, электронного экранирования, косвенных спин-спиновых, прямых магнитных диполь-дипольных, квадрупольных взаимодействий. Влияние подвижности молекул жидких кристаллов на вид спинового гамильтониана. Усреднение гамильтониана магнитных взаимодействий.

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

Раздел 2. Спектры ЯМР жидких кристаллов (лекции – 6 часов, семинары – 6 часов)

Лекции: Спектры ЯМР  $^1\text{H}$  в жидкокристаллическом и изотропном состояниях. Спектры ЯМР  $^2\text{H}$  на естественном содержании дейтерия и в обогащенных образцах. Спектры ЯМР  $^{13}\text{C}$  с развязкой от протонов и при переносе намагничённости. Спектроскопия локальных полей. Применение численных методов для расчёта спектров ЯМР жидких кристаллов.

Семинары: анализ экспериментальных спектров ЯМР жидких кристаллов, предоставленных преподавателем, с помощью современного программного

обеспечения, определение параметров магнитных взаимодействий спинов, выяснение структуры молекул.

### **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 «Квантовая радиофизика. Магнитный резонанс и его приложения», методические материалы и указания, расположенные на сайте преподавателя. Не рекомендуется использовать материалы из Интернет-ресурса [wikipedia.org](http://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) Молекулярное строение жидких кристаллов.
- 2) Ориентационный и трансляционный порядок в жидких кристаллах.
- 3) Взаимодействие жидких кристаллов с магнитным полем спектрометра ЯМР.
- 4) Подготовка образцов для экспериментов.
- 5) Мультипликативные базисные функции, матрицы гамильтонианов магнитных взаимодействий
- 6) Спектры ЯМР  $^1\text{H}$  в ЖК, их особенности, примеры.
- 7) Спектры дейтеронного ЯМР в ЖК, их особенности, примеры.
- 8) Спектры ЯМР  $^{13}\text{C}$  в ЖК, их особенности, примеры.
- 9) Спектроскопия локальных полей в жидких кристаллах.

### **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 необходим 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 1Н и 2Н 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. M. Goldman. Quantum Description of High-Resolution NMR in Liquids. — N.-Y.: Oxford University Press, 1988.

4. C. L. Khetrapal, A. C. 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**

## **Раздел 4. Разработчики программы**

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