

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Директор по образовательной
деятельности

_____ С.Т. Князев
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1149498	Основы резонанса

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Прикладные математика и физика	Код ОП 1. 03.03.01/33.01
Направление подготовки 1. Прикладные математика и физика	Код направления и уровня подготовки 1. 03.03.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Денисов Алексей Юрьевич	к.ф.-м.н., доцент	доцент	Теоретической физики и прикладной математики
2	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Согласовано:

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Основы резонанса

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает дисциплину «Ядерный и электронный резонанс» и является введением в прикладной раздел физики – теорию ядерного и электронного резонанса. Трудно переоценить практическое значение методов и результатов, накопленных в физике магнитного резонанса. Так, всем известно применение магниторезонансной томографии в медицине. В данном курсе излагаются основные понятия и принципы магнитного резонанса, а также стационарные и импульсные резонансные методы исследования свойств веществ. В частности, анализируется поведение неравновесной намагниченности с классической и квантовой точки зрения с учетом релаксационных процессов, протекающих в системе, механизмы продольной (спин-спиновой) и поперечной (спин-решеточной) релаксации.

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Ядерный и электронный резонанс	6
ИТОГО по модулю:		6

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	1. Теоретическая физика
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Ядерный и электронный резонанс	ОПК-2 - Способен проводить под научным руководством исследования на основе современных методов в конкретной области	З-1 - Демонстрировать понимание теоретических основ методов, используемых для проведения научных исследований в профильной области У-1 - Соотносить цель и задачи исследования с набором методов

	профессиональной деятельности	исследования, выбрать необходимое сочетание цели и средств П-1 - Иметь опыт выполнения стандартных исследований с использованием серийного научного и технологического оборудования, стандартной методологии и методов исследований Д-2 - Проявлять заинтересованность в содержании и результатах исследовательской работы
--	----------------------------------	---

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Ядерный и электронный резонанс

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Денисов Алексей Юрьевич	к.ф.-м.н., доцент	доцент	Теоретической физики и прикладной математики
2	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Денисов Алексей Юрьевич, доцент, Теоретической физики и прикладной математики
- Мазуренко Владимир Гаврилович, Профессор, теоретической физики и прикладной математики

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*
Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Основы магнитного резонанса	<p>Явление и история магнитного резонанса. Области применения магнитного резонанса.</p> <p>Электронные и ядерные спиновые моменты. Гиромагнитное отношение, g-фактор. Множитель Ланде. Соотношение между ядерным и электронным спиновыми моментами.</p> <p>Энергия магнитных моментов в магнитном поле. Энергетический спектр. Зеемановские уровни электронов и ядер. Зеемановские уровни атома водорода в сильном магнитном поле.</p> <p>Поведение момента в постоянном магнитном поле. Уравнение движения магнитного момента. Ларморовская частота прецессии. Переход во вращающуюся систему координат.</p> <p>Воздействие высокочастотного подмагничивающего поля на спиновую систему в постоянном магнитном поле. Вероятность перехода между уровнями. Условие магнитного резонанса. Стимулированные и спонтанные переходы. Параллельная и перпендикулярная ориентация ВЧ-поля. ЭПР и ЯМР переходы.</p> <p>Тепловое равновесие и спин-решёточная релаксация. Населённости зеемановских уровней при тепловом равновесии. Разность населённостей и воздействие ВЧ-поля без учёта релаксации. Насыщение. Характерное время насыщения.</p>

		<p>Скорость поглощения энергии средой без учёта релаксации. Понятие спин-решёточной релаксации. Разность населённостей с учётом спин-решёточной релаксации. Время спин-решёточной релаксации. Скорость поглощения энергии средой с учётом релаксации.</p> <p>Релаксационная зависимость продольной намагниченности. Время продольной релаксации макроскопической намагниченности. Термодинамически равновесное значение намагниченности.</p> <p>Релаксационная зависимость поперечной намагниченности. Время поперечной релаксации макроскопической намагниченности. Механизмы, приводящие к уменьшению поперечной составляющей намагниченности. Влияние градиента магнитного поля на намагниченность. «Грязное» время поперечной релаксации намагниченности.</p> <p>Уравнения Блоха. Пределы применимости уравнений. Решение уравнений для намагниченности в условиях постоянного магнитного поля. Вид уравнений Блоха во вращающейся системе координат. Эффективное поле во вращающейся системе координат.</p>
<p>P2</p>	<p>Методы наблюдения магнитного резонанса</p>	<p>Методы наблюдения сигнала магнитного резонанса. Стационарные и импульсные методы. Импульсные методы слабого поля. Способы фор-мирования начальной намагниченности в методах слабого поля. Методы одновременной поляризации спинов и регистрации свободной прецессии ядер.</p> <p>Стационарное решение уравнений Блоха при воздействии переменного поля. Решение в пределе слабого и сильного насыщения. Понятие спиновой температуры. Комплексная восприимчивость. Функции дисперсии и поглощения.</p> <p>Поглощение и комплексная восприимчивость. Энергия, индуктивность и импеданс катушки с образцом. Относительное изменение сопротивления катушки при внесении образца. Связь между поглощаемой мощностью, амплитудой переменного поля и восприимчивостью. Сигнал поглощения.</p> <p>Поглощение и насыщение. Интенсивность сигнала поглощения в резонансе. Оптимальная амплитуда переменного поля. Связь вероятности перехода, амплитуды переменного поля и времени поперечной релаксации.</p> <p>Сигнал свободной прецессии ядер. Схема регистрации сигнала свободной прецессии. ЭДС наводимая прецессирующей намагниченностью в приёмном контуре. Вывод формулы амплитуды сигнала, регистрируемого приёмной катушкой. Начальная амплитуда сигнала. Коэффициент заполнения. Ориентационная зависимость.</p> <p>Процесс выключения поляризующего поля в импульсных методах ЯМР. Основные стадии процесса выключения. Адиабатически медленное и быстрое выключение поляризующего поля.</p>

		<p>Воздействие радиочастотного импульса на ядерную намагниченность. 90 и 180-градусный импульс.</p> <p>Явление спинового эха. Объяснение явления. Пределы применимости метода спинового эха.</p> <p>Методы спинового эха. Последовательность Карра-Парселла, чередование фазы, метод Мейбума-Гилла. Измерение времени спин-решеточной релаксации.</p>
Р3	Магнитный резонанс в атоме водорода	<p>Метод спин-гамильтониана. Постановка задачи. Вариант построения спин-гамильтониана с помощью теории возмущений.</p> <p>Спин-гамильтониан атома водорода. Атом водорода в постоянном магнитном поле. Полуклассический вывод взаимодействия s-электрона с ядром. Формула Ферми для сверхтонкого взаимодействия. Константа сверхтонкого взаимодействия. Гамильтониан контактного взаимодействия.</p> <p>Энергетический спектр атома водорода. Спин-гамильтониан атома водорода во внешнем магнитном поле. Собственные энергии и собственные функции гамильтониана. Предельные случаи больших и малых полей. Схема энергетических уровней атома водорода.</p> <p>Спектр ЭПР атома водорода в перпендикулярном ВЧ поле. Вероятность перехода между уровнями в первом и втором порядке теории возмущений. Резонансные частоты (поля) в пределе большого внешнего поля. Структура переходов в перпендикулярном возбуждающем поле.</p> <p>Спектр ЭПР атома водорода в параллельном ВЧ поле. Эффект смешивания состояний с различными проекциями спинов электронов и ядер. Вероятность перехода между уровнями при учёте сверхтонкого взаимодействия. Резонансная частота (поле) в пределе большого внешнего поля.</p> <p>Спектр ЭПР атома водорода в нулевом внешнем магнитном поле. Структура энергетических уровней и вероятность перехода между уровнями в атоме водорода в нулевом поле. Длина волны основного космического фона. Выражение спин-гамильтониана атома водорода через полный спиновый момент атома. Синглетное и триплетное состояние атома водорода.</p>
Р4	Магнитный резонанс и диполь-дипольное взаимодействие	<p>Спин-гамильтониан диполь-дипольного взаимодействия в случае жёсткой решётки. Гамильтониан Гейзенберга. Спин-гамильтониан диполь-дипольного взаимодействия в сферических координатах. Секулярная часть гамильтониана.</p> <p>Спектр ЯМР двух протонов. Гамильтониан двуядерной системы во внешнем магнитном поле. Учёт секулярной части диполь-дипольного взаимодействия. Схема энергетических уровней системы двух протонов. Структура переходов в возбуждающем поле. Пример исследования монокристаллов гипса. Качественный анализ влияния несекулярной части.</p> <p>Второй момент линии поглощения ЯМР. Характеристика формы линии резонанса с помощью моментов. Функция формы. Связь функции формы и поглощаемой мощности при</p>

		<p>резонансе. Второй момент в случае диполь-дипольного взаимодействия.</p> <p>Спин-гамильтониан анизотропного сверхтонкого взаимодействия. Гамильтониан диполь-дипольного электрон-ядерного взаимодействия. Понятие электронной спиновой плотности. Спин-гамильтониан анизотропного сверхтонкого взаимодействия. Свойства матрицы анизотропного сверхтонкого взаимодействия. Сопоставление анизотропного и изотропного сверхтонкого взаимодействия. Усреднение анизотропного сверхтонкого взаимодействия в жидкости.</p>
P5	Сдвиги резонансной частоты	<p>Химическое экранирование. Диамагнитный эффект влияния электронов на спин ядра. Эффективное поле, действующее на ядро. Постоянная экранирования. Формула Лэмба.</p> <p>Найтовский сдвиг. Опытные факты сдвига резонансной частоты в металлах. Качественное объяснение найтовского сдвига.</p> <p>Поправки к g-фактору. Эффективный магнитный момент электрона. Матрица g-фактора. Эффективное магнитное поле, действующее на электрон. Анизотропия g-фактора</p>
P6	Ядерная магнитная релаксация	<p>Явление релаксации в ЯМР. Причина релаксации. Вероятности релаксационных переходов. Скорости спин-решёточной и спин-спиновой релаксации. Ширина линии ЯМР и T2. Вероятность релаксационных переходов. Корреляционная функция случайного процесса. Выражение вероятности перехода через спектральную плотность мощности случайного процесса.</p> <p>Спин-решёточная релаксация и спиновая температура в многоуровневых системах. Возможность введения спиновой температуры. Уравнение для спиновой температуры. Выражение для спин-решеточной релаксации в многоуровневой системе в методе спиновой температуры.</p> <p>Матрица плотности. Связь среднего по ансамблю и матрицы плотности. Уравнение для матрицы плотности. Уравнение для матрицы плотности в представлении взаимодействия. Выражение для матрицы плотности, получаемое во втором порядке нестационарной теории возмущения.</p> <p>Основное уравнение теории Редфилда. Основные предположения, в которых получается уравнение Редфилда для матрицы плотности. Выражение коэффициентов уравнения через спектральные плотности мощности случайной добавки к основному гамильтониану системы.</p> <p>Спин-решёточная релаксация во флуктуирующем магнитном поле. Выражение для скорости вероятности переходов в двухуровневой системе спинов, помещённых в случайное магнитное поле. Выражение для скорости спин-решёточной релаксации в этом случае.</p> <p>Спин-спиновая релаксация во флуктуирующем магнитном поле. Релаксация во флуктуирующем поле с учётом взаимодействия ядерных спинов. Явление сужения линии</p>

		<p>ЯМР. Выражение для скоростей релаксации в условиях изотропного флуктуирующего поля и сильного сужения. Секулярное и несекулярное уширение. Зависимость скоростей релаксации от времени корреляции. Критерии «жесткой» и «мягкой» решётки.</p> <p>Скалярная релаксация. Гамильтониан СТВ. Причины модуляции СТВ. Скорости релаксации в изотропном случае в пределе сильного сужения для системы «малоподвижных» ядер и невысокой концентрации локализованных электронных спинов. Скорости релаксации в изотропном случае в пределе сильного сужения для системы «малоподвижных» ядер и высокой концентрации локализованных электронных спинов. Скорости релаксации в изотропном случае для системы «подвижных» ядер и локализованных электронных спинов. Скорости релаксации для системы ядер и делокализованных электронных спинов.</p> <p>Диполь-дипольная релаксация при взаимодействии двух одинаковых спинов. Система кинетических уравнений для населённости в трёхуровневой системе. Решение для z-компоненты намагниченности. Гамильтониан диполь-дипольного взаимодействия. Методика получения выражений для вероятности переходов при ДДВ. Скорость спин-решёточной релаксации в случае ДДВ. Зависимость T1 от времени корреляции. Скорости релаксаций в пределе сильного сужения. Скорости релаксаций с учётом трансляционной диффузии ядра в системе однотипных ядер.</p> <p>Диполь-дипольная релаксация при взаимодействии спинов разного сорта. Система кинетических уравнений для населённости в четырёхуровневой системе. Решение для z-компоненты намагниченности в пределе быстрой релаксации одного из спинов. Скорость спин-решёточной релаксации в этом случае. Скорости релаксаций в пределе сильного сужения. Эффект 3/2.</p> <p>Спин-вращательная релаксация. Источник флуктуаций при вращении молекулы. Гамильтониан спин-вращательного взаимодействия. Оценка среднего квадрата частоты вращения молекулы. Связь среднего времени взаимодействия между молекулами и характерного времени диффузионного вращения. Оценка скорости спин-вращательной релаксации в условиях сильного сужения.</p> <p>Релаксация за счёт анизотропии электронного экранирования ядра. Источник флуктуаций при анизотропном экранировании ядра. Зеемановский гамильтониан с учётом химического сдвига. Скорость спин-решёточной релаксации в пределе сильного сужения. Связь спин-спиновой и спин-решёточной релаксации в этом пределе.</p> <p>Квадрупольная релаксация. Качественный анализ процесса квадратупольной релаксации. Гамильтониан квадратупольного взаимодействия. Методика получения выражения для скорости спин-решёточной релаксации. Скорости релаксаций в пределе сильного сужения. Эффект антиэкранирования.</p>
--	--	--

		<p>Релаксация в условиях гетерогенности системы и суперпозиции различных взаимодействий. Проблемы интерпретации при наличии гетерогенной среды. Влияние межфазового обмена на форму релаксационной кривой. Выделение релаксационных вкладов в условиях суперпозиции взаимодействий. Сопоставление основных механизмов релаксации.</p>
Р7	Дополнительные разделы магнитного резонанса	<p>Явление самодиффузии. Импульсный метод для измерения коэф-фициента самодиффузии. Условия измерения. Расчёт сигнала спинового эха с учетом влияния самодиффузии в условиях линейного внешнего по-стоянного градиента магнитного поля. Условия выделения вклада само-диффузии в сигнале спинового эха на фоне спин-спиновой релаксации. Расчёт коэффициента самодиффузии по начальной амплитуде спинового эха. Метод градиентного импульса.</p> <p>Эффект Оверхаузера. Суть явления двойного резонанса. Преимущества использования двойных резонансов. Основное усло-вие выполнения эффекта Оверхаузера. Рассмотрение эффекта на примере простейшей системы с СТВ. Разрешенные и запрещённые переходы в си-стеме. Решение для продольной ядерной намагниченности. Коэффициент динамической поляризации ядер. Фактор насыщения. Оценки усиления ядерной поляризации в случае диполь-дипольного и скалярного взаимо-действий. Факторы, уменьшающие динамическую поляризацию. Коэффи-циент утечки.</p> <p>Двойной электронно-ядерный резонанс. Эксперимент Фехера по ДЭЯР для изотопа Si29. Модельный одноэлектронный гамильтониан N ядерной системы изотопа кремния. ЭПР и ЯМР частоты в системе. Суть эксперимента на примере простейшей четырёхуровневой системы с СТВ.</p> <p>Эффект твёрдого тела. Насыщение запрещённых переходов в че-тырёхуровневой системе. Уравнения для стационарных населённостей в такой системе. Продольная намагниченность в этом случае. Сопоставле-ние с равновесной намагниченностью. Оценка усиления ядерной поляри-зации.</p> <p>Ядерный квадрупольный резонанс. Квадрупольный момент ядра. Спин-гамильтониан квадрупольного взаимодействия. Параметры гради-ентного поля и асимметрии поля.</p> <p>Трёхуровневый мазер Бломбергена. Общие принципы работы мазеров. Получение условия генерации на примере трёхуровневой системы.</p>

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональн	учебно-	Технология	ОПК-2 - Способен	Д-2 - Проявлять

ое воспитание	исследовательская, научно-исследовательская	формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности	проводить под научным руководством исследования на основе современных методов в конкретной области профессиональной деятельности	заинтересованность в содержании и результатах исследовательской работы
---------------	---	--	--	--

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Ядерный и электронный резонанс

Электронные ресурсы (издания)

1. Альтшулер, С. А.; Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп; Издательство Наука, Главная редакция физико-математической литературы, Москва; 1972; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=477788> (Электронное издание)
2. Абрагам, А., А.; Ядерный магнетизм : монография.; Издательство иностранной литературы, Москва; 1963; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=560247> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Сликтер, Чарльз П., Ч. П., Корст, Н. Н., Скороцкий, Г. В.; Основы теории магнитного резонанса; Мир, Москва; 1981 (18 экз.)
2. Альтшулер, С. А.; Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп; Наука, Москва; 1972 (23 экз.)
3. Керрингтон, А.; Магнитный резонанс и его применение в химии; Мир, Москва; 1970 (10 экз.)
4. Лундин, А. Г.; Ядерный магнитный резонанс: Основы и применения; Наука, Новосибирск; 1980 (6 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека
<http://www.gpntb.ru>
2. Российская национальная библиотека
<http://www.rsl.ru>
3. Публичная электронная библиотека

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Электронные образовательные ресурсы

<http://study.urfu.ru/view/>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Ядерный и электронный резонанс

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не требуется
2	Лабораторные занятия	Оборудование, соответствующее требованиям организации учебного процесса в соответствии с санитарными правилами и нормами Подключение к сети Интернет	Mathematica 6.0.1 Educational Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM