

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук**

**УТВЕРЖДАЮ**  
Зам. директора Института по научной работе  
С. В. Лебедев

\_\_\_\_\_ 2015 г.



Рабочая программа обязательной дисциплины  
**ЭПР: основы применения**  
основной образовательной программы подготовки научно-педагогических кадров в  
аспирантуре по направлению 03.06.01 Физика и астрономия

профиль подготовки:  
01.04.02 Теоретическая физика

Квалификация: Исследователь. Преподаватель –исследователь.

Принято Ученым советом  
Протокол № 1 от « 20» февраля 2015 г.

Санкт-Петербург  
2015 г.

*Шлепкин*

Рабочая программа составлена на основании федеральных государственных образовательных стандартов основных образовательных программ высшего образования подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 03.06.01 Физика и астрономия, специальность 01.04.02 Теоретическая физика.

### **1. Цель освоения дисциплины**

Целью курса является обеспечение понимания основ спектроскопии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и современных применений метода ЭПР для исследования конденсированных систем.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

2.1. Учебная дисциплина «ЭПР: основы и применения» входит в вариативную часть ООП (дисциплины по выбору).

Обучение ведется в форме аудиторных занятий, лабораторных работ и самостоятельной подготовки. Изучение дисциплины обеспечивает знания в области спектроскопии электронного парамагнитного резонанса твердых тел, является основой для самостоятельной научно-исследовательской работы в области исследования свойств конденсированных систем.

В результате прохождения курса обучения по данной дисциплины аспирант должен освоить базовые принципы физики твердого тела в русле проблематики лаборатории (группы), где работает его научный руководитель, и где будет проходить самостоятельная научная работа аспиранта. Изучение данной дисциплины и специфика подачи отдельных вопросов может варьироваться в зависимости от индивидуального плана работы аспиранта, согласованного с его научным руководителем в целях оптимального соответствия решаемым задачам.

### **3. Требования к результатам освоения дисциплины**

Процесс изучения дисциплины «ЭПР: основы и применения» направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки «Физика и астрономия»:

#### **3.1. Универсальные компетенции:**

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1).

#### **3.2. Общепрофессиональные компетенции:**

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1).

#### **3.3. Профессиональные компетенции:**

- способность планировать и организовывать работу по теоретическим проектам, направленным на изучение новых физических эффектов (ПК-1);
- способность получать и обрабатывать информацию по новым методам расчетов в области теоретической физики (ПК-2);
- способность анализировать и систематизировать научную информацию по современным достижениям в области общей физики и специальных областей физики по теме исследования (ПК-3);
- способность анализировать физические явления на качественном уровне, умение делать оценки и развить навыки работы с экспериментальными данными (ПК-4).

### **4. Структура и содержание дисциплины «ЭПР: основы и применения»:**

общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 часа).

#### 4.1. Объем дисциплины и количество учебных часов:

Вид учебной работы	Трудоемкость (в часах)
Аудиторные занятия	54
Лекции	54
Семинары	-
Лабораторные занятия	
Другие виды учебной работы (зачет по темам курса)	
Внеаудиторные занятия	90
Самостоятельная работа аспиранта	90
ИТОГО	144
Вид итогового контроля	зачет

#### 4.2. Структура дисциплины

№ п/п	Тема	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу, и трудоемкость (в часах)			
		Лек	СЕМ	Лаб	СР
1	Введение	6			10
2	Магнитный момент электронной оболочки свободного атома (иона).	6			10
3.	Условия магнитного резонанса.	6			10
4	Классическое поведение магнитного момента в магнитном поле.	6			10
5	Атом водорода в основном состоянии в магнитном поле.	6			10
6	Атом водорода в возбужденных состояниях в магнитном поле.	6			10
7	Случай промежуточного кристаллического поля.	6			10
8	Анизотропный g-фактор.	6			10
9	Анизотропное сверхтонкое взаимодействие	6			10
10	зачет				
	ИТОГО	54			90

### 5. Содержание разделов (тем) дисциплины

#### 5.1. Содержание аудиторных занятий

##### Тема 1 – Введение

(лекции - 6 часа)

Открытие ЭПР Е.К. Завойским и место ЭПР в спектроскопии. Радиоспектроскопия. Системы с неспаренными спинами. Магнитный диполь. Магнитный момент диполя. Магнитное поле, создаваемое магнитным диполем. Гиромагнитное отношение. g-фактор орбитального и спинового моментов.

(СР - 10 часов)

##### Тема 2 – Магнитный момент электронной оболочки свободного атома (иона)



*(лекции - 6 часа)*

Терм и подтерм. Спин-орбитальное взаимодействие. Правила Хунда. Правило интервалов Ландэ.  $g$ -фактор Ландэ. Магнитный диполь в магнитном поле. Эффект Зеемана для отдельного спина (уровни энергии для спина в магнитном поле). Взаимодействие магнитных диполей между собой.

*(СР – 10 часов)*

**Тема 3 – Условия магнитного резонанса**

*(лекции - 6 часа)*

Населенности энергетических уровней в магнитном поле. Магнитная восприимчивость. Правила отбора. Спиновая релаксация. Изменение населенностей спиновых уровней под действием резонансного микроволнового поля и спиновой релаксации. Поглощение (излучение) электромагнитной энергии в ЭПР (ЯМР) экспериментах.

*(СР – 10 часов)*

**Тема 4 – Классическое поведение магнитного момента в магнитном поле**

*(лекции - 6 часа)*

Уравнения Блоха. Времена спиновой релаксации, введенные для продольной  $T_1$  и поперечной  $T_2$  спиновой релаксации.

*(СР – 10 часов)*

**Тема 5 – Атом водорода в основном состоянии в магнитном поле**

*(лекции - 6 часа)*

Сверхтонкое взаимодействие. Изотропное сверхтонкое взаимодействие в основном состоянии атома водорода. Гамильтониан и энергетические уровни для атома водорода в магнитном поле (формула Брейта-Раби); правила отбора. Разобщенное и сопряженное представления. Энергетические уровни для атома дейтерия, атомов и ионов, имеющих в основном состоянии один неспаренный  $s$ -электрон ( $^2S_{1/2}$  состояние).

Аппаратура ЭПР и принципы регистрации спектров ЭПР (часть 1-я)

*(СР – 10 часов)*

**Тема 6 - Атом водорода в возбужденных состояниях в магнитном поле**

*(лекции - 6 часа)*

Спин-орбитальное взаимодействие для  $2p$  электрона в атоме водорода. ЭПР в конденсированном состоянии. Атомы и ионы в состоянии  $^2S_{1/2}$  в кристаллическом поле. Переходные элементы в конденсированных средах. Подход кристаллического поля, классификация кристаллических полей.

Аппаратура ЭПР и принципы регистрации спектров ЭПР (часть 2-я)

*(СР – 10 часов)*

**Тема 7 - Случай промежуточного кристаллического поля**

*(лекции – 6 часа)*

Термы основных состояний переходных элементов с неспаренными  $d$ -электронами. Замораживание орбитального момента в невырожденном орбитальном состоянии. Спиновый гамильтониан для орбитального синглета. Применение для орбитального триплета в основном состоянии.

Симуляция спектров ЭПР с различными сверхтонкими и суперсверхтонкими взаимодействиями с использованием программы WinEPR.

*(СР – 10 часов)*

**Тема 8 - Анизотропный  $g$ -фактор**

*(лекции - 6 часа)*

Тонкая структура. Вклад диполь-дипольного взаимодействия между двумя электронными

спинами в тонкую структуру. Энергетические уровни в магнитном поле систем с полужелым и целым спинами. Крамерсовы дублеты.

Расчет энергетических уровней и спектров ЭПР с помощью программ R-Spectr и View EPR.  
(СР – 10 часов)

### **Тема 9 - Анизотропное сверхтонкое взаимодействие**

(лекции - 6 часа)

Случай слабого поля или редкоземельная схема. Термы и подтермы основных состояний редкоземельных элементов с неспаренными  $f$ -электронами. Уровни энергии и волновые функции для основного состояния редкоземельных ионов в магнитном поле.

(СР – 10 часов)

#### **5.2. Самостоятельная работа аспиранта**

Самостоятельная работа аспиранта включает повторение лекционного материала по темам, чтение рекомендованной литературы и научной периодики, а также изучение методических рекомендаций для самостоятельной работы.

## **6. Оценочные средства для текущего контроля и промежуточной аттестации**

Цель контроля - получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

### **6.1. Текущий контроль**

Текущий контроль проводится еженедельно. Критерии формирования оценки – посещаемость занятий, активность студентов на лекциях, уровень подготовки.

Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, и развитие практических умений.

### **6.2. Аттестация**

Аттестация проводится в форме зачета. Критерии формирования оценки – уровень знаний пройденной части курса.

Контрольные вопросы для аттестации:

N	Контрольные вопросы
1.	Магнитный момент диполя. Магнитное поле, создаваемое магнитным диполем.
2.	Гиромагнитное отношение. $g$ -фактор орбитального и спинового моментов.
3.	Магнитный диполь в магнитном поле. Взаимодействие магнитных диполей между собой.
4.	Эффект Зеемана для отдельного спина (уровни энергии для спина в магнитном поле).
5.	Населенности энергетических уровней в магнитном поле. Магнитная восприимчивость. Правила отбора. Спиновая релаксация.
6.	Времена спиновой релаксации, введенные для продольной $T_1$ и поперечной $T_2$ спиновой релаксации.
7.	Сверхтонкое взаимодействие. Изотропное сверхтонкое взаимодействие в основном состоянии атома водорода.
8.	Гамильтониан и энергетические уровни для атома водорода в магнитном поле; правила отбора.
9.	Энергетические уровни для атома дейтерия, атомов и ионов, имеющих в основном состоянии один неспаренный $s$ -электрон
10.	Спин-орбитальное взаимодействие для $2p$ электрона в атоме



	водорода.
11.	Переходные элементы в конденсированных средах. Подход кристаллического поля, классификация кристаллических полей.
12.	Термы основных состояний переходных элементов с неспаренными $d$ -электронами.
13.	Термы и подтермы основных состояний редкоземельных элементов с неспаренными $f$ -электронами.
14.	Тонкая структура. Вклад диполь-дипольного взаимодействия между двумя электронными спинами в тонкую структуру.
15.	Энергетические уровни в магнитном поле систем с полуцелым и целым спинами. Крамерсовы дублеты.
16.	Уровни энергии и волновые функции для основного состояния редкоземельных ионов в магнитном поле.

### 7. Образовательные технологии

В процессе обучения применяются следующие образовательные технологии:

1. Сопровождение лекций показом визуального материала;
2. Использование компьютерных моделей физических процессов в полупроводниках и диэлектриках;

### 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Учебные, учебно-методические и иные библиотечно-информационные ресурсы обеспечивают учебный процесс и гарантируют возможность качественного освоения аспирантом образовательной программы. ФТИ им. А.Ф.Иоффе располагает обширной библиотекой, включающей общенаучную и специальную литературу.

### 9. Литература

#### Основная литература:

1. С.А. Альтшулер, Б.М. Козырев, Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп, Наука, Москва 1972 г.
2. А. Абрагам, Б. Блини, Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов, Мир, Москва 1972 г.
3. Дж. Вертц, Дж. Болтон, Теория и практические приложения метода ЭПР, Мир, Москва 1975 г.

#### Дополнительная литература

1. P.G. Baranov and N.G. Romanov, Magnetic Resonance in Micro- and Nanostructures, Applied Magnetic Resonance, vol. 21, pp. 165-193 (2001). (pdf-файл обзора прилагается).

### 10. Программное обеспечение

1. Новые полупроводниковые материалы. Наноструктуры. Характеристики и свойства. База данных разработана и поддерживается сектором теоретических основ микроэлектроники: <http://www.matprop.ru/>

### 11. Интернет-ресурсы

#### Отечественные журналы:

- Физика твердого тела  
электронная версия; доступ с 1992 по текущий год
- Физика и техника полупроводников  
электронная версия; доступ с 1992 по текущий год
- ЖЭТФ; электронная версия; доступ с 2001 по текущий год
- Письма в ЖЭТФ электронная версия; доступ с 2008 по текущий год
- Успехи физических наук электронная версия; доступ с 1988 по текущий год

#### Иностраные журналы:

1. Physical Review B (American Physical Society) электронная версия; доступ с 1970 по

текущий год;

2. Physical Review Letters (American Physical Society) электронная версия; доступ с 1958 по текущий год;
3. Applied Physics A: Materials Science & Processing (Springer) подписка с 2013 года
4. Central European Journal of Physics доступ с 2003 по текущий год
5. The European Physical Journal B Condensed Matter and Complex Systems (Springer) подписка с 2013 года
6. International Journal of Modern Physics B (World Scientific Publishing Company) электронная версия; доступ с 2003 по текущий год
7. Journal of Physics and Chemistry of Solids (Elsevier (Science Direct) электронная версия; доступ с 1958 по 2009
8. Journal of Physics : Condensed Matter (UK Institute of Physics ) электронная версия; доступ с 1989 по текущий год
9. Nanotechnology (UK Institute of Physics) электронная версия; доступ с 1990 по текущий год
10. Nature (Nature Publishing Group) электронная версия; доступ с 1997 по текущий год
11. Nature Materials (Nature Publishing Group) электронная версия; доступ с 2002 по текущий год
12. New Journal of Physics" (UK Institute of Physics) электронная версия; доступ с 1999 по текущий год
13. Philosophical Magazine (Taylor & Francis Group) электронная версия; доступ с 1798 по текущий год
14. Philosophical Magazine Letters (Taylor & Francis Group) ) электронная версия; доступ с 1987 по текущий год
15. Physica B (Condensed Matter) (Elsevier (Science Direct) электронная версия; доступ с 1999 по текущий год
16. Physica E (Nanostructures) ) (Elsevier (Science Direct) электронная версия; доступ с 2003 по текущий год
17. Physica Status Solidi A (Wiley) электронная версия; доступ с 1996 по текущий год
18. Physica Status Solidi B (Wiley) электронная версия; доступ с 1996 по текущий год
19. Physica Status Solidi C (Wiley) электронная версия; доступ с 2003 по текущий год
20. Physica Status Solidi RRL (Wiley) электронная версия; доступ с 2007 по текущий год
21. Solid State Communications (Elsevier (Science Direct) электронная версия; доступ с 1972 по 2010

## **12. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН располагает материально-технической базой, соответствующей санитарно-техническим нормам и обеспечивающей проведение всех видов теоретической подготовки, предусмотренной учебным планом. Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Лаборатория микроволновой спектроскопии кристаллов имеет оборудование для исследования спектров ЭПР, двойного электронно-ядерного резонанса, а также оптического детектирования магнитного резонанса в интервале температур от гелиевых до комнатной.

### ***Наименование оборудования для проведения занятий по дисциплине:***

1. Лекционная аудитория
2. Мультимедийный проектор

3. Персональный компьютер
4. Экспериментальные установки по исследованию ЭПР и ОДМР.
5. Программы R-Spectr и View EPR для расчета энергетических уровней и симуляции спектров ЭПР и ОДМР.

Программа разработана профессором, д.ф.-м.н. П.Г. Барановым.