

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

УТВЕРЖДАЮ

Директор

С.В. Иванов

13 » 104 2022 г.



Рабочая программа факультативной дисциплины

ЭПР: ОСНОВЫ И ПРИМЕНЕНИЯ

программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре
по научной специальности 1.3.3 Теоретическая физика

Принята решением Ученого совета
от 04.03.2022 № 03/22

Санкт-Петербург

2022 г.

Рабочая программа факультативной дисциплины «ЭПР: основы и применения» составлена на основании программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности 1.3.3 Теоретическая физика (далее – программа аспирантуры)

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

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

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ПРОГРАММЫ АСПИРАТУРЫ

2.1. Дисциплина «ЭПР: основы и применения» входит в факультативную часть образовательного компонента программы аспирантуры с целью расширения и углубления научных и прикладных знаний аспирантов и организуется по выбору и желанию аспиранта.

2.2. Изучение дисциплины обеспечивает знания в области спектроскопии электронного парамагнитного резонанса твердых тел. Изучение дисциплины является основой для самостоятельной научно-исследовательской работы в области исследования свойств конденсированных систем.

В результате прохождения курса обучения по данной дисциплине аспирант должен освоить базовые принципы физики твердого тела в русле проблематики лаборатории (сектора), где работает его научный руководитель и где будет проходить самостоятельная научная работа аспиранта.

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

знать:

основные разделы научной дисциплины «ЭПР: основы и применения»:

- в чем заключается явление ЭПР;
- теорию ЭПР;
- особенности релаксационных процессов взаимодействия спиновой системы с атомами кристаллической решетки;
- экспериментальные методы в изучении ЭПР;
- применения ЭПР в прикладных исследованиях;

уметь:

- самостоятельно изучать и понимать научную литературу, связанную с проблемами физики твердого тела;
- самостоятельно работать на спектрометре ЭПР;
- владеть математическим аппаратом и свободно пользоваться основными

формулами, используемыми для оценок величин, характеризующих релаксационные процессы в кристаллических системах различной размерности;

- профессионально излагать результаты своих исследований и представлять их в виде научных публикаций, информационно-аналитических материалов и презентаций;

владеть:

- навыками обработки результатов ЭПР-спектров;

- свободно владеть знаниями по фундаментальным разделам физики конденсированных сред, основными понятиями радиоспектроскопии в пределах, необходимых для понимания специальной научной литературы, связанной с проблемами физики конденсированных сред, в том числе в системах пониженной размерности.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Объем дисциплины и количество учебных часов:

Вид учебной работы	Трудоемкость (в часах)
Лекции	54
Семинары	-
Самостоятельная работа аспиранта	90
ИТОГО	144
Вид итогового контроля	зачет

4.2. Содержание разделов (тем) 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

4.3. Содержание тем

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 ки

(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 полуцелым 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)

4.4. 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.

5. 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;

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. Промежуточная аттестация

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

Контрольные вопросы для аттестации:

№	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 полужелым и целым спинами. Крамерсовы дублеты.
16.	Уровни энергии и волновые функции для основного состояния редкоземельных ионов в магнитном поле.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. 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.

7.2. Дополнительная литература

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 прикладывается).

7.3. Интернет-ресурсы

Отечественные журналы:

- Физика твердого тела, электронная версия;
- Физика и техника полупроводников, электронная версия;
- ЖЭТФ ; электронная версия;
- Письма в ЖЭТФ электронная версия;
- Успехи физических наук электронная версия ;

Иностранные журналы:

1. Physical Review B (American Physical Society) электронная версия;
2. Physical Review Letters (American Physical Society) электронная версия;
4. Applied Physics A: Materials Science & Processing (Springer);
5. Central European Journal of Physics;
6. The European Physical Journal B Condensed Matter and Complex Systems (Springer);
7. International Journal of Modern Physics B (World Scientific Publishing Company) электронная версия;
8. Journal of Physics and Chemistry of Solids (Elsevier (Science Direct) электронная версия;

9. Journal of Physics : Condensed Matter (UK Institute of Physics) электронная версия;
10. Nanotechnology (UK Institute of Physics) электронная версия;
11. Nature (Nature Publishing Group) электронная версия;
12. Nature Materials (Nature Publishing Group) электронная версия;
13. New Journal of Physics" (UK Institute of Physics) электронная версия;
14. Philosophical Magazine (Taylor & Francis Group) электронная версия;
15. Philosophical Magazine Letters (Taylor & Francis Group) электронная версия;
16. Physica B (Condensed Matter) (Elsevier (Science Direct) электронная версия;
17. Physica E (Nanostructures)) (Elsevier (Science Direct) электронная версия;
18. Physica Status Solidi A (Wiley)) электронная версия;
19. Physica Status Solidi B (Wiley) электронная версия;
20. Physica Status Solidi C (Wiley) электронная версия;
21. Physica Status Solidi RRL (Wiley) электронная версия;
22. Solid State Communications (Elsevier (Science Direct) электронная версия

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Лекционная аудитория
2. Мультимедийный проектор и (или) LCD панель большого размера.
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:
главный научный сотрудник - заведующий лабораторией
лаб. микроволновой спектроскопии кристаллов,
д-р физ.-мат. наук, Баранов П.Г.