МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по образовательной деятельности КФУ
Проф. Д.А. Таюрский
_____ «___»_____20__г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Ядерный магнитный резонанс в биомедицинских приложениях Б1.В.ДВ.3

Направление подготовки: 12.03.04 - Биотехнические системы и технологии
Профиль подготовки: не предусмотрено
Квалификация выпускника: бакалавр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский

Автор(ы):
Рудакова М.А. , Филиппов А.В.

Рецензент(ы):
Азанчеев Н.М.

СОГЛАСОВАНО:
Заведующий(ая) кафедрой: Скирда В. Д.
Протокол заседания кафедры No ___ от "____" _____ 201__г
Учебно-методическая комиссия Института физики:
Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__г

Регистрационный No 6161718

Казань
2018

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) научный сотрудник, к.н. Рудакова М.А. Учебно-научная лаборатория Экологические инновации Институт экологии и природопользования ; профессор, д.н. (доцент) Филиппов А.В. Кафедра физики молекулярных систем Отделение физики , Andrey.Filippov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины (модуля) Современные методы ЯМР в биомедицинских исследованиях in vitro состоит в том, чтобы студенты владели физическими основами и современными методическими приемами в спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) в изучении структуры органических и биоорганических соединений с использованием ЯМР. В рамках курса обсуждены наиболее важные спектральные параметры, составляющие необходимый минимум для освоения курсов по спектроскопии ЯМР; рассмотрено теоретическое введение к решению задач по спектроскопии ЯМР.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.3 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 12.03.04 Биотехнические системы и технологии и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 3 курсе, 6 семестр.

Курс Ядерный магнитный резонанс в биомедицинских приложениях логически увязан со всеми дисциплинами указанного цикла. Успешное усвоение данного курса требует знаний физики и математики в рамках программ, изучаемых в университете. Теоретическая составляющая курса дополняется практическими занятиями, полученными в лаборатории ЯМР Института физики. Для успешного освоения курса студенту необходимо владеть элементарными знаниями в области статистической обработки результатов, владеть практическими навыками выполнения физического эксперимента.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-2 (профессиональные компетенции)	готовность к участию в проведении медико-биологических, экологических и научно-технических исследований с применением технических средств, информационных технологий и методов обработки результатов

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные принципы ЯМР спектроскопии, их математическое описание;

2. должен уметь:

использовать при работе справочную и учебную литературу и другие необходимые источники информации.

3. должен владеть:

знаниями о современных методических приемах в ЯМР спектроскопии, о методах наблюдения ЯМР сигналов, равно как и о методах обработки и анализа результатов эксперимента

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания на практике.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) 144 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 6 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Физические основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения.	6	1-2	2	6	0	Устный опрос
2.	Тема 2. Параметры спектров ЯМР.	6	3-4	2	6	0	Устный опрос
3.	Тема 3. Химические сдвиги ЯМР 1H и 13C в органических соединениях.	6	5-6	2	6	0	Устный опрос
4.	Тема 4. Спин-спиновое взаимодействие и строение органических соединений.	6	7-8	4	8	0	Контрольная работа
5.	Тема 5. Динамическая спектроскопия ЯМР.	6	8-9	2	6	0	Устный опрос
6.	Тема 6. Эксперименты двойного резонанса.	6	10-11	2	6	0	Устный опрос
7.	Тема 7. Одномерные эксперименты ЯМР с использованием сложных импульсных последовательностей.	6	12-13	2	6	0	Устный опрос
8.	Тема 8. Двумерная (2D) спектроскопия ЯМР.	6	14-15	2	10	0	Контрольная работа
.	Тема . Итоговая форма контроля	6		0	0	0	Экзамен
	Итого			18	54	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Физические основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

История открытия. Угловой момент количества движения ядер. Ядра в статическом магнитном поле. Энергия ядер в магнитном поле. Населенности энергетических уровней. Макроскопическое намагничивание. Основные принципы эксперимента ЯМР. CW-спектрометр. Импульсный метод ЯМР. Классическое описание импульсного эксперимента. Релаксация. Фазовая когерентность. Фурье-преобразование. Накопление спектра. Импульсный спектрометр ЯМР.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Демонстрация экспериментов: Импульсный метод ЯМР. Релаксация. Фурье-преобразование. Накопление спектра на импульсном спектрометре ЯМР.

Тема 2. Параметры спектров ЯМР.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Определение химического сдвига. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновая система AX. Спиновая система AX2. Спиновые системы AXn. Правила мультиплетности. Спиновая система AMX. Спиновые системы An. Правила интерпретации сверхтонкой структуры в спектрах ЯМР. Порядок спектра. Номенклатура спиновых систем. Спиновая система AB. Системы AX → AB → A2. Трехспиновые системы. Трехспиновая система ABX. Четырехспиновые системы. Спиновые системы A2X2 и A2B2. Спиновые системы AA´XX´ и AA´BB´. Спин-спиновое взаимодействие протонов с другими ядрами. Интенсивности спектров ЯМР 1H. Интенсивности сигналов ЯМР 13C.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Проведение экспериментов, демонстрирующих: Спин-спиновое взаимодействие. Регистрация спиновых систем AX, AX2, AXn, AB. Системы AX → AB → A2. Трехспиновые системы ABX. Четырехспиновые системы. Эксперименты по наблюдению спин-спинового взаимодействие протонов с другими ядрами.

Тема 3. Химические сдвиги ЯМР 1H и 13C в органических соединениях.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Эффекты кольцевого тока. Эффекты электрического поля. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь и эффекты растворителей. Изотопные эффекты. Химические сдвиги 1H некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Альдегиды. Химические сдвиги протонов OH, SH и NH групп. Химические сдвиги 13C некоторых групп органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Аллены. Альдегиды и кетоны. Карбоновые кислоты. Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Запись спектров ЯМР соединений, в которых проявляются: Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Эффекты кольцевого тока. Эффекты электрического поля.

Тема 4. Спин-спиновое взаимодействие и строение органических соединений.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Геминальные константы спин-спинового взаимодействия. Вицинальные константы спин-спинового взаимодействия. Зависимость вицинальной константы от двугранного угла. Эффекты заместителей. Константы 3JHH в ароматических соединениях. Дальние константы спин-спинового взаимодействия. Прямые константы спин-спинового взаимодействия.

практическое занятие (8 часа(ов)):

ЯМР Эксперименты по наблюдению спиновых систем, позволяющих наблюдать: Геминальные константы спин-спинового взаимодействия. Вицинальные константы спин-спинового взаимодействия.Константы 3JHH в ароматических соединениях. Дальние константы спин-спинового взаимодействия. Прямые константы спин-спинового взаимодействия.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Тема 5. Динамическая спектроскопия ЯМР.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Общие положения. Параметры активации. Оценка предельных ошибок. Практическое применение динамической спектроскопии ЯМР. Вращение вокруг одинарных связей С-С. Вращение вокруг частично двойных связей. Вращение вокруг двойных связей С=С. Инверсия атомов азота и фосфора. Инверсия циклов. Валентная таутомерия.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Эксперименты по определению: параметров активации и ценке предельных ошибок для процессов: Вращение вокруг одинарных связей С-С. Вращение вокруг частично двойных связей. Вращение вокруг двойных связей С=С. Инверсия атомов азота и фосфора. Инверсия циклов. Валентная таутомерия.

Тема 6. Эксперименты двойного резонанса.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Развязывание спина" в спектроскопии ЯМР 1Н. Подавление сигнала растворителя. "Развязывание спинов" в спектроскопии ЯМР 13С. Частичная развязка от протонов."1Н - off-resonance". "Развязка с выключением" (Gated Decoupling). "Обратная развязка с выключением" (Inverse Gated Decoupling). Ядерный эффект Оверхаузера. Факторы увеличения интенсивностей сигналов ЯМР. Применение ЯЭО в органической химии. Экспериментальные аспекты ЯЭО.

практическое занятие (6 часа(ов)):

ЯМР эксперименты: Развязывание спина" в спектроскопии ЯМР 1Н. Подавление сигнала растворителя. "Развязывание спинов" в спектроскопии ЯМР 13С. Частичная развязка от протонов."1Н - off-resonance". "Развязка с выключением" (Gated Decoupling). "Обратная развязка с выключением" (Inverse Gated Decoupling).

Тема 7. Одномерные эксперименты ЯМР с использованием сложных импульсных последовательностей.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

J-Модулированные эксперименты "спин-эхо". Эксперимент с селективным обращением населенностей (SPI). Эксперименты с нечувствительными ядрами, "усиленными" переносом поляризации (INEPT). Эксперимент по неискаженному усилению переноса поляризации (DEPT). Одномерный эксперимент INADEQUATE.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Проведение ЯМР экспериментов: Эксперимент с селективным обращением населенностей (SPI). Эксперименты с нечувствительными ядрами, "усиленными" переносом поляризации (INEPT). Эксперимент по неискаженному усилению переноса поляризации (DEPT). Одномерный эксперимент INADEQUATE.

Тема 8. Двумерная (2D) спектроскопия ЯМР.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Гетероядерная 2D-J,-спектроскопия ЯМР 13С. Гомоядерная (1Н, 1Н) 2D -корреляционная спектроскопия (COSY) ЯМР. Гетероядерная (13С, 1Н) 2D -корреляционная спектроскопия (HETCOR) ЯМР. Двумерная ЯМР (1Н, 1Н) спектроскопия (NOESY).

практическое занятие (10 часа(ов)):

Двумерные ЯМР эксперименты: Гомоядерная (1Н, 1Н) 2D -корреляционная спектроскопия (COSY) ЯМР. Гетероядерная (13С, 1Н) 2D -корреляционная спектроскопия (HETCOR) ЯМР. Двумерная ЯМР (1Н, 1Н) спектроскопия (NOESY).

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Физические					

основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения.

6	1-2	подготовка к

устному опросу

	4	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Параметры спектров ЯМР.	6	3-4	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
3.	Тема 3. Химические сдвиги ЯМР 1Н и 13С в органических соединениях.	6	5-6	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
4.	Тема 4. Спин-спиновое взаимодействие и строение органических соединений.	6	7-8	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
5.	Тема 5. Динамическая спектроскопия ЯМР.	6	8-9	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
6.	Тема 6. Эксперименты двойного резонанса.	6	10-11	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
7.	Тема 7. Одномерные эксперименты ЯМР с использованием сложных импульсных последовательностей.	6	12-13	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
8.	Тема 8. Двумерная (2D) спектроскопия ЯМР.	6	14-15	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
	Итого				36	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Методическая модель преподавания дисциплины основана на применении активных методов обучения. Принципами организации учебного процесса являются:

- выбор методов преподавания в зависимости от различных факторов, влияющих на организацию учебного процесса;
- активное участие слушателей в учебном процессе;
- проведение практических занятий на современных спектрометрах (съемка и анализ спектров, использование характеристичных параметров для определения структуры органического вещества и т. д.), определяющих приобретение навыков решения проблемы;
- приведение примеров применения изучаемого теоретического материала к реальным практическим ситуациям.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Физические основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения.

устный опрос , примерные вопросы:

История открытия. Угловой момент количества движения ядер. Ядра в статическом магнитном поле. Энергия ядер в магнитном поле. Населенности энергетических уровней. Макроскопическое намагничивание. Основные принципы эксперимента ЯМР. CW-спектрометр. Импульсный метод ЯМР. Классическое описание импульсного эксперимента. Релаксация. Фазовая когерентность. Фурье-преобразование. Накопление спектра. Импульсный спектрометр ЯМР.

Тема 2. Параметры спектров ЯМР.

устный опрос , примерные вопросы:

Определение химического сдвига. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновая система AX. Спиновая система AX2. Спиновые системы AXn. Правила мультиплетности. Спиновая система AMX. Спиновые системы An. Правила интерпретации сверхтонкой структуры в спектрах ЯМР. Порядок спектра. Номенклатура спиновых систем. Спиновая система AB. Системы AX → AB → A2. Трехспиновые системы. Трехспиновая система ABX. Четырехспиновые системы. Спиновые системы A2X2 и A2B2. Спиновые системы AA´XX´ и AA´BB´. Спин-спиновое взаимодействие протонов с другими ядрами. Интенсивности спектров ЯМР 1H. Интенсивности сигналов ЯМР 13C.

Тема 3. Химические сдвиги ЯМР 1H и 13C в органических соединениях.

устный опрос , примерные вопросы:

Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Эффекты кольцевого тока. Эффекты электрического поля. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь и эффекты растворителей. Изотопные эффекты. Химические сдвиги 1H некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Альдегиды. Химические сдвиги протонов OH, SH и NH групп. Химические сдвиги 13C некоторых групп органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Аллены. Альдегиды и кетоны. Карбоновые кислоты. Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность.

Тема 4. Спин-спиновое взаимодействие и строение органических соединений.

контрольная работа , примерные вопросы:

Геминальные константы спин-спинового взаимодействия. Вицинальные константы спин-спинового взаимодействия. Зависимость вицинальной константы от двугранного угла. Эффекты заместителей. Константы 3JHH в ароматических соединениях. Дальние константы спин-спинового взаимодействия. Прямые константы спин-спинового взаимодействия.

Тема 5. Динамическая спектроскопия ЯМР.

устный опрос , примерные вопросы:

Общие положения. Параметры активации. Оценка предельных ошибок. Практическое применение динамической спектроскопии ЯМР. Вращение вокруг одинарных связей C-C. Вращение вокруг частично двойных связей. Вращение вокруг двойных связей C=C. Инверсия атомов азота и фосфора. Инверсия циклов. Валентная таутомерия.

Тема 6. Эксперименты двойного резонанса.

устный опрос , примерные вопросы:

Развязывание спина" в спектроскопии ЯМР 1H. Подавление сигнала растворителя. "Развязывание спинов" в спектроскопии ЯМР 13C. Частичная развязка от протонов."1H - off-resonance". "Развязка с выключением" (Gated Decoupling). "Обратная развязка с выключением" (Inverse Gated Decoupling). Ядерный эффект Оверхаузера. Факторы увеличения интенсивностей сигналов ЯМР. Применение ЯЭО в органической химии. Экспериментальные аспекты ЯЭО.

Тема 7. Одномерные эксперименты ЯМР с использованием сложных импульсных последовательностей.

устный опрос , примерные вопросы:

J-Модулированные эксперименты "спин-эхо". Эксперимент с селективным обращением населенностей (SPI). Эксперименты с нечувствительными ядрами, "усиленными" переносом поляризации (INEPT). Эксперимент по неискаженному усилению переноса поляризации (DEPT). Одномерный эксперимент INADEQUATE.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Тема 8. Двумерная (2D) спектроскопия ЯМР.

контрольная работа , примерные вопросы:

Гетероядерная 2D-J,-спектроскопия ЯМР 13С. Гомоядерная (1Н, 1Н) 2D -корреляционная спектроскопия (COSY) ЯМР. Гетероядерная (13С, 1Н) 2D -корреляционная спектроскопия (HETCOR) ЯМР. Двумерная ЯМР (1Н, 1Н) спектроскопия (NOESY).

Итоговая форма контроля

экзамен

Примерные вопросы к экзамену:

БИЛЕТ N 1

1. История открытия. Угловой момент количества движения ядер. Ядра в статическом магнитном поле. Энергия ядер в магнитном поле.
2. Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп.
3. Введение в динамическую спектроскопию ЯМР. Общие положения. Параметры активации. Оценка предельных ошибок.

БИЛЕТ N 2

1. Населенности энергетических уровней. Макроскопическое намагничивание. Основные принципы эксперимента ЯМР. CW-спектрометр.
2. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Эффекты кольцевого тока.
3. Практическое применение динамической спектроскопии ЯМР. Вращение вокруг одинарных связей С-С.

БИЛЕТ N 3

1. Импульсный метод ЯМР. Классическое описание импульсного эксперимента.
2. Эффекты электрического поля.
3. Вращение вокруг частично двойных связей. Вращение вокруг двойных связей С=С.

БИЛЕТ N 4

1. Релаксация. Фазовая когерентность.
2. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь и эффекты растворителей.
3. Инверсия атомов азота и фосфора. Инверсия циклов. Валентная таутомерия.

БИЛЕТ N 5

1. Определение химического сдвига.
2. Изотопные эффекты.
3. Развязывание спина" в спектроскопии ЯМР 1Н. Подавление сигнала растворителя.

БИЛЕТ N 6

1. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновая система АХ. Спиновая система АХ2.
2. Химические сдвиги 1Н некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы.
3. "Развязывание спинов" в спектроскопии ЯМР 13С. Частичная развязка от протонов."1Н - off-resonance".

БИЛЕТ N 7

1. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновые системы АХn. Правила мультиплетности. Спиновая система АМХ. Спиновые системы Аn.
2. Химические сдвиги 1Н некоторых органических соединений. Алкены. Арены.
3. "Развязка с выключением" (Gated Decoupling). "Обратная развязка с выключением" (Inverse Gated Decoupling).

БИЛЕТ N 8

1. Спин-спиновое взаимодействие. Правила мультиплетности.

2. Химические сдвиги 1H некоторых органических соединений. Алкины. Альдегиды.

3. Ядерный эффект Оверхаузера. Применение ЯЭО в органической химии. Экспериментальные аспекты ЯЭО.

БИЛЕТ N 9

1. Номенклатура спиновых систем. Спиновая система AB. Системы AX → AB → A2. 2. Химические сдвиги протонов OH, SH и NH групп.

3. Геминальные константы спин-спинового взаимодействия.

БИЛЕТ N 10

1. Трехспиновые системы. Трехспиновая система ABX.

2. Химические сдвиги 13C некоторых групп органических соединений. Алканы и циклоалканы.

3. Гетероядерная 2D-J,-спектроскопия ЯМР 13C.

БИЛЕТ N 11

1. Четырехспиновые системы. Спиновые системы A2X2 и A2B2. Спиновые системы AA´XX´ и AA´BB´.

2. Химические сдвиги 13C некоторых групп органических соединений. Алкены. Арены.

3. Гомоядерная (1H, 1H) 2D -корреляционная спектроскопия (COSY) ЯМР.

БИЛЕТ N 12

1. Спин-спиновое взаимодействие протонов с другими ядрами.

2. Химические сдвиги 13C некоторых групп органических соединений. Альдегиды и кетоны.

3. Гетероядерная (13C, 1H) 2D -корреляционная спектроскопия (HETCOR) ЯМР.

БИЛЕТ N 13

1. Спиновая система AMX. Спиновые системы An. Правила интерпретации сверхтонкой структуры в спектрах ЯМР.

2. Химические сдвиги 13C некоторых групп органических соединений. Карбоновые кислоты.

3. Двумерная ЯМР (1H, 1H) спектроскопия (NOESY).

БИЛЕТ N 14

1. Интенсивности спектров ЯМР 1H. Интенсивности сигналов ЯМР 13C.

2. Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность.

3. Константы 3JHH в ароматических соединениях.

БИЛЕТ N 15

1. Фурье-преобразование. Накопление спектра. Импульсный спектрометр ЯМР.

2. Вицинальные константы спин-спинового взаимодействия. Зависимость вицинальной константы от двугранного угла.

3. Дальние константы спин-спинового взаимодействия. Прямые константы спин-спинового взаимодействия.

7.1. Основная литература:

1. Основы ядерного магнитного резонанса: Учебное пособие/Евстигнеев М.П., Лантушенко А.О., Костюков В.В. и др. - М.: Вузовский учебник, НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 247 с.: 60x90 1/16 (Переплёт) ISBN 978-5-9558-0414-9 - Режим доступа: http://znanium.com/bookread2.php?book=496299

2. Взаимодействие физических полей с биологическими объектами / Е.И. Нефедов, Т.И. Субботина, А.А. Яшин. - М.: КУРС, НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 344 с.: 60x90 1/16 ISBN 978-5-906818-19-5 - Режим доступа: http://znanium.com/bookread2.php?book=535220

7.2. Дополнительная литература:

Физико-химические методы исследования / Криштафович В.И. - М.:Дашков и К, 2018. - 208 с.: ISBN 978-5-394-02842-7 - Режим доступа: http://znanium.com/catalog/product/513811

Ядерный магнитный резонанс. Теория и практика. В 3 ч. Ч. 2: Учебное пособие / Бельская Н.П., Ельцов О.С., - 2-е изд., стер. - М.:Флинта, 2018. - 124 с.: ISBN 978-5-9765-3557-2 - Режим доступа:http://znanium.com/bookread2.php?book=966424

7.3. Интернет-ресурсы:

Basic Practical NMR Concepts - http://www2.chemistry.msu.edu/facilities/nmr/handouts/DH%20NMR%20Basics.pdf

LECTURE COURSE: NMR SPECTROSCOPY - http://www.oci.uzh.ch/group.pages/zerbe/NMR.pdf

The Basics of NMR - http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/inside.htm

Ф.Х. Каратаева, В.В. Клочков. Спектроскопия ЯМР в органической химии. - http://www.kpfu.ru/docs/F413273025/NMR_spectroscopy_1.pdf

Юльметов А.Р., Клочков В.В. Введение в ЯМР спектроскопию - http://shelly.ksu.ru/portal/docs/F1474408276/NMR.pdf

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Ядерный магнитный резонанс в биомедицинских приложениях" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB,audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудованием имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "Консультант студента" , доступ к которой предоставлен студентам. Электронная библиотечная система "Консультант студента" предоставляет полнотекстовый доступ к современной учебной литературе по основным дисциплинам, изучаемым в медицинских вузах (представлены издания как чисто медицинского профиля, так и по естественным, точным и общественным наукам). ЭБС предоставляет вузу наиболее полные комплекты необходимой литературы в соответствии с требованиями государственных образовательных стандартов с соблюдением авторских и смежных прав.

ЯМР спектрометр "AVANCE IITM - 500" (Bruker) (2006 года выпуска)

Многофункциональный спектрометр со сверхпроводящим магнитом, работающий в импульсном режиме с преобразованием Фурье. Спектрометр "AVANCE IITM - 500" позволяет производить съемку спектров ЯМР в растворах, гелеобразных и твердых порошкообразных органических веществах на ядрах 1H (500 МГц), 13C (125.69 МГц)13C, 14N, 15N, 19F, 29Si, 31P и далее. Спектрометр снабжен температурной приставкой, работает в режиме внутренней стабилизации по линии резонанса 2H. Чувствительность на ядрах 1H составляет 200 : 1 для 0.1% раствора этилбензола. Разрешающая способность 0.2 Гц при использовании ампул диаметром 5 мм (1H). Может быть использован при проведении современных двумерных ЯМР экспериментов (COSY, HSQC, HNQC, NOESY, ROESY- модификации). Режим HR-MAS позволяет проводить эксперименты и вязких средах, в тканях и других родственных системах живых организмов, а подход CP-MAS - эксперименты в монокристаллах и порошках органических соединений. Есть сертификат соответствия Госстандарта РФ.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 12.03.04 "Биотехнические системы и технологии" и профилю подготовки не предусмотрено .

Автор(ы):
Рудакова М.А. _____
Филиппов А.В. _____
"__" _____ 201 __ г.

Рецензент(ы):
Азанчеев Н.М. _____
"__" _____ 201 __ г.