

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



Программа дисциплины

Современные методы ядерного магнитного резонанса в биомедицинских исследованиях in vitro
Б3.ДВ.8

Направление подготовки: 011200.62 - Физика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Клочков В.В.

Рецензент(ы):

Азанчеев Н.М.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Таюрский Д. А.

Протокол заседания кафедры № ____ от "____" 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК № ____ от "____" 201__ г

Регистрационный № 630514

Казань

2014

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) ведущий научный сотрудник, д.н. (профессор) Клочков В.В. Научная лаборатория ядерного магнитного резонанса Кафедра общей физики , Vladimir.Klochkov@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 " Б3.ДВ.8 Профессиональный" основной образовательной программы 011200.62 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Курс Современные методы ЯМР в биомедицинских исследованиях *in vitro* 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 в лаборатории ЯМР Института физики. Все это сочетается с другими практическими занятиями, где используются физические методы исследований, физические приборы и статистическая обработка результатов измерений.

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	способностью использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач
ПК-10 (профессиональные компетенции)	способностью понимать и излагать получаемую информацию и представлять результаты физических исследований
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике базовые профессиональные навыки
ПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью эксплуатировать современную физическую аппаратуру и оборудование
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин (в соответствии с профилем подготовки)

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике базовые общепрофессиональные знания теории и методов физических исследований (в соответствии с профилем подготовки)
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации (в соответствии с профилем подготовки)

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:

обладать 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 8 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.	8	1-2	4	4	0	тестирование
2.	Тема 2. Параметры спектров ЯМР.	8	3-4	4	4	0	тестирование

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
3.	Тема 3. Химические сдвиги ЯМР 1Н и 13С в органических соединениях.	8	5-6	4	4	0	тестирование
4.	Тема 4. Спин-спиновое взаимодействие и строение органических соединений.	8	7-8	3	3	0	тестирование
5.	Тема 5. Динамическая спектроскопия ЯМР.	8	8-9	3	3	0	тестирование
6.	Тема 6. Эксперименты двойного резонанса.	8	10-11	4	4	0	тестирование
7.	Тема 7. Одномерные эксперименты ЯМР с использованием сложных импульсных последовательностей.	8	12-13	4	4	0	тестирование
8.	Тема 8. Двумерная (2D) спектроскопия ЯМР.	8	14-15	4	4	0	тестирование
.	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	экзамен
	Итого			30	30	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Физические основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения.

лекционное занятие (4 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 (4 часа(ов)):

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

Тема 2. Параметры спектров ЯМР.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Определение химического сдвига. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновая система АХ.

Спиновая система АХ2. Спиновые системы АХn. Правила мультиплетности. Спиновая система АМХ. Спиновые системы Ап. Правила интерпретации сверхтонкой структуры в спектрах ЯМР.

Порядок спектра. Номенклатура спиновых систем. Спиновая система АВ. Системы АХ → АВ → А2. Трехспиновые системы. Трехспиновая система АВХ. Четырехспиновые системы. Спиновые системы А2Х2 и А2В2. Спиновые системы АА'ХХ' и АА'ВВ'. Спин-спиновое взаимодействие протонов с другими ядрами. Интенсивности спектров ЯМР 1Н. Интенсивности сигналов ЯМР 13С.

практическое занятие (4 часа(ов)):

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

Тема 3. Химические сдвиги ЯМР 1Н и 13С в органических соединениях.

лекционное занятие (4 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 1Н некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Альдегиды. Химические сдвиги протонов OH, SH и NH групп. Химические сдвиги 13С 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 (4 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 (3 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 (3 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.

Тема 5. Динамическая спектроскопия ЯМР.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

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.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Эксперименты по определению: параметров активации и ценке предельных ошибок для процессов: 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.

лекционное занятие (4 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 (4 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 (4 часа(ов)):

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

практическое занятие (4 часа(ов)):

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

Тема 8. Двумерная (2D) спектроскопия ЯМР.

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Гетероядерная 2D-J, J_\perp -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 (4 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.	8	1-2	подготовка к тестированию	6	тестирование
2.	Тема 2. Параметры спектров ЯМР.	8	3-4	подготовка к тестированию	6	тестирование
3.	Тема 3. Химические сдвиги ЯМР 1Н и 13С в органических соединениях.	8	5-6	подготовка к тестированию	6	тестирование
4.	Тема 4. Спин-спиновое взаимодействие и строение органических соединений.	8	7-8	подготовка к тестированию	6	тестирование
5.	Тема 5. Динамическая спектроскопия ЯМР.	8	8-9	подготовка к тестированию	6	тестирование
6.	Тема 6. Эксперименты двойного резонанса.	8	10-11	подготовка к тестированию	6	тестирование

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
7.	Тема 7. Одномерные эксперименты ЯМР с использованием сложных импульсных последовательностей.	8	12-13	подготовка к тестированию	6	тестирование
8.	Тема 8. Двумерная (2D) спектроскопия ЯМР.	8	14-15	подготовка к тестированию	6	тестирование
	Итого				48	

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 характеристических 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.

тестирование , 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.

тестирование , 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.

тестирование , 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 ^{1}H некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Альдегиды. Химические сдвиги протонов OH , SH и NH групп. Химические сдвиги ^{13}C 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.

тестирование , примерные вопросы:

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

Тема 5. Динамическая спектроскопия ЯМР.

тестирование , примерные вопросы:

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 тautомерия.

Тема 6. Эксперименты двойного резонанса.

тестирование , примерные вопросы:

"Развязывание спина" в спектроскопии ЯМР ^{1}H . Подавление сигнала растворителя. "Развязывание спинов" в спектроскопии ЯМР ^{13}C . Частичная развязка от протонов." ^{1}H - 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.

тестирование , примерные вопросы:

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

Тема 8. Двумерная (2D) спектроскопия ЯМР.

тестирование , примерные вопросы:

Гетероядерная 2D-J, J_\perp -спектроскопия ЯМР ^{13}C . Гомоядерная (^{1}H , ^{1}H) 2D -корреляционная спектроскопия (COSY) ЯМР. Гетероядерная (^{13}C , ^{1}H) 2D -корреляционная спектроскопия (HETCOR) ЯМР. Двумерная ЯМР (^{1}H , ^{1}H) спектроскопия (NOESY).

Тема . Итоговая форма контроля

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 An.
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 1Н 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 АВ. Системы АХ → АВ → А2. 2. Химические сдвиги протонов OH, SH и NH групп.
3. Геминальные константы спин-спинового взаимодействия.

БИЛЕТ N 10

1. Трехспиновые системы. Трехспиновая система АВХ.
2. Химические сдвиги 13С некоторых групп органических соединений. Алканы и циклоалканы.
3. Гетероядерная 2D-J, J-спектроскопия ЯМР 13С.

БИЛЕТ N 11

1. Четырехспиновые системы. Спиновые системы А2Х2 и А2В2. Спиновые системы АА'ХХ' и АА'ВВ'.
2. Химические сдвиги 13С 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 ^{13}C некоторых групп органических соединений. Альдегиды и кетоны.
3. Гетероядерная (^{13}C , ^1H) 2D -корреляционная спектроскопия (HETCOR) ЯМР.

БИЛЕТ N 13

1. Спиновая система АМХ. Спиновые системы Ап. Правила интерпретации сверхтонкой структуры в спектрах ЯМР.
2. Химические сдвиги ^{13}C некоторых групп органических соединений. Карбоновые кислоты.
3. Двумерная ЯМР (^1H , ^1H) спектроскопия (NOESY).

БИЛЕТ N 14

1. Интенсивности спектров ЯМР ^1H . Интенсивности сигналов ЯМР ^{13}C .
2. Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность.
3. Константы ЗJНН 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. Дальные константы спин-спинового взаимодействия. Прямые константы спин-спинового взаимодействия.

7.1. Основная литература:

1. Карагаева Ф.Х. Клочков В.В. Спектроскопия ЯМР ^1H и ^{13}C в органической химии. - Казань: Издательство Казанского государственного университета, 2007. - 154 с.
- 2.Юльметов А.Р., Клочков В.В. Введение в ЯМР спектроскопию. [Электронный ресурс]
<http://shelly.ksu.ru/portal/docs/F1474408276/NMR.pdf>
3. Сергеев, Н. А. Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса : монография / Н. А. Сергеев, Д. С. Рябушкин. - М. : Логос, 2013. - 272 с. - ISBN 978-5-98704-754-5
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=469025>

7.2. Дополнительная литература:

1. Теоретическая физика : учеб. пособие для студентов физ. специальностей ун-тов : в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского .? М. : ФИЗМАТЛИТ, 2001-. Т. 3: Квантовая механика (нерелятивистская теория) .? 5-е изд., стер. ? 2001 .? 808 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=2380
2. Магнитно-резонансная томография: учебное пособие. Синицын В.Е., Устюжанин Д.В. / Под ред. С.К. Тернового. 2008. - 208 с.
<http://www.studmedlib.ru/ru/book/ISBN9785970408353.html>

7.3. Интернет-ресурсы:

- LECTURE COURSE: NMR SPECTROSCOPY - <http://www.oci.uzh.ch/group.pages/zerbe/NMR.pdf>
NMR Spectroscopy - <http://www.chemistry.msu.edu/.../nmr/nmr1.htm>
The Basics of NMR - <http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/inside.htm>

Ф.Х. Карагаева, 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 "Современные методы ядерного магнитного резонанса в биомедицинских исследованиях in vitro" 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 оборудование 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 "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), ^{13}C (125.69 МГц), ^{15}N , ^{14}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P 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 011200.62 "Физика" и профилю подготовки не предусмотрено .

Автор(ы):

Клочков В.В. _____

"__" 201 __ г.

Рецензент(ы):

Азанчеев Н.М. _____

"__" 201 __ г.