

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.


КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ДЕПАРТАМЕНТ
ОБРАЗОВАНИЯ
(по КФУ)

_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Современные методы ядерного магнитного резонанса в биомедицинских исследованиях in vitro
БЗ.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 No ____ от "____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

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

Регистрационный No 6133517

Казань
2017

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 ЯМР кафедры медицинской 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 1H и 13C 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 AX. Спиновая система AX₂. Спиновые системы AX_n. Правила мультиплетности. Спиновая система AMX. Спиновые системы A_n. 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 (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 ¹H и ¹³C 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 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 (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 ³J_{HH} 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 ³J_{HH} 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 оценке 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 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.

практическое занятие (4 часа(ов)):

ЯМР эксперименты: Развязывание спина" в спектроскопии ЯМР ^1H . Подавление сигнала растворителя. "Развязывание спинов" в спектроскопии ЯМР ^{13}C . Частичная развязка от протонов. " ^1H - 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 населенностей (SPI). Эксперименты с нечувствительными ядрами, "усиленными" переносом поляризации (INEPT). Эксперимент по неискаженному усилению переноса поляризации (DEPT). Одномерный эксперимент INADEQUATE.

практическое занятие (4 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 (4 часа(ов)):

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

практическое занятие (4 часа(ов)):

Двумерные ЯМР эксперименты: Гомоядерная (^1H , ^1H) 2D -корреляционная спектроскопия (COSY) ЯМР. Гетероядерная (^{13}C , ^1H) 2D -корреляционная спектроскопия (HETCOR) ЯМР. Двумерная ЯМР (^1H , ^1H) 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 ^1H и ^{13}C 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 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.

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 AX_n. Правила мультиплетности. Спиновая система AMX. Спиновые системы A_n. 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 ^1H 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 $^3J_{\text{HH}}$ 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 $\text{C}-\text{C}$. Вращение вокруг частично двойных связей. Вращение вокруг двойных связей $\text{C}=\text{C}$. Инверсия атомов азота и фосфора. Инверсия циклов. Валентная таутомерия.

Тема 6. Эксперименты двойного резонанса.

тестирование , примерные вопросы:

Развязывание спина" в спектроскопии ЯМР ^1H . Подавление сигнала растворителя. "Развязывание спинов" в спектроскопии ЯМР ^{13}C . 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.

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 усилению переноса поляризации (DEPT). Одномерный эксперимент INADEQUATE.

Тема 8. Двумерная (2D) спектроскопия ЯМР.

тестирование , примерные вопросы:

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

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 C=C.

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 ^1H . Подавление сигнала растворителя.

БИЛЕТ N 6

1. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновая система AX. Спиновая система AX₂.
2. Химические сдвиги ^1H некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы.
3. "Развязывание спинов" в спектроскопии ЯМР ^{13}C . Частичная развязка от протонов." ^1H - off-resonance".

БИЛЕТ N 7

1. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновые системы AX_n. Правила мультиплетности. Спиновая система AMX. Спиновые системы A_n.
2. Химические сдвиги ^1H 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 \rightarrow AB \rightarrow 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 ^{13}C некоторых групп органических соединений. Алканы и циклоалканы.
3. Гетероядерная 2D-J, ρ -спектроскопия ЯМР ^{13}C .

БИЛЕТ N 11

1. Четырехспиновые системы. Спиновые системы A₂X₂ и A₂B₂. Спиновые системы AA'XX' и AA'BB'.
2. Химические сдвиги ^{13}C 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 AMX. Спиновые системы An. 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 $^3J_{\text{HH}}$ 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. Каратаева 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, 2003-. Т. 3: Квантовая механика (нерелятивистская теория) .? 5-е изд., стер. ? 2004 .? 800 с.
2. 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>

7.3. 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. 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 "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), ^{13}C , ^{14}N , ^{15}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, HMQC, 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.