

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



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Ядерный магнитный резонанс биологических объектов

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Медицинская физика

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2024

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и): Хайрутдинов Б.И. ; Польшаков Владимир Иванович

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

| Шифр компетенции | Расшифровка приобретаемой компетенции |
|------------------|--|
| ПК-2 | Способен свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-исследовательских задач, и применять результаты научных исследований в проектной деятельности. |

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

основы ЯМР спектроскопии, взаимодействие электромагнитного излучения с веществом, принципы получения ЯМР спектров высокого разрешения

Должен уметь:

интерпретировать экспериментальные ЯМР спектры, выполнять отнесение спектральных линий для простых пептидов

Должен владеть:

навыками работы со спектрами ЯМР

Должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания на практике

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.08.02 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 03.04.02 "Физика (Медицинская физика)" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 1 курсе в 2 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) на 108 часа(ов).

Контактная работа - 43 часа(ов), в том числе лекции - 12 часа(ов), практические занятия - 0 часа(ов), лабораторные работы - 30 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 1 часа(ов).

Самостоятельная работа - 29 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 36 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: экзамен во 2 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

| N | Разделы дисциплины / модуля | Се-местр | Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах) | | | | | | Само-стоя-тельная ра-бота |
|----|---|----------|--|--------------------|------------------------------|---------------------------|-----------------------------|---------------------------|---------------------------|
| | | | Лекции, всего | Лекции в эл. форме | Практи-ческие занятия, всего | Практи-ческие в эл. форме | Лабора-торные работы, всего | Лабора-торные в эл. форме | |
| 1. | Тема 1. Введение в метод ЯМР | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 2 |
| 2. | Тема 2. Основы ЯМР спектроскопия белков | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 3 | 0 | 2 |

| N | Разделы дисциплины / модуля | Се- местр | Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах) | | | | | | Само- стоя- тель- ная ра- бота |
|-----|---|--------------|---|--------------------------|--|-------------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|---|
| | | | Лекции, всего | Лекции в эл. форме | Практи- ческие занятия, всего | Практи- ческие в эл. форме | Лаборато- рные работы, всего | Лаборато- рные в эл. форме | |
| 3. | Тема 3. ЯМР азотистых оснований и нуклеотидов. Приготовление образцов | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 2 |
| 4. | Тема 4. Методы 2D спектроскопии | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 3 | 0 | 2 |
| 5. | Тема 5. Методы 3D спектроскопии | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 2 |
| 6. | Тема 6. Реконструкция структуры из спектров ЯМР | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 3 | 0 | 2 |
| 7. | Тема 7. Константы спин-спинового и диполь-дипольного взаимодействия | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 2 |
| 8. | Тема 8. Способы ориентирования биомолекул в анизотропных средах | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 3 | 0 | 3 |
| 9. | Тема 9. Особенности спектров ЯМР нуклеиновых кислот | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 3 |
| 10. | Тема 10. ЯМР в изучении динамических свойств биомолекул | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 3 | 0 | 3 |
| 11. | Тема 11. Процессы химического обмена | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 3 |
| 12. | Тема 12. ЯМР в изучении молекулярных комплексов | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 3 | 0 | 3 |
| | Итого | | 12 | 0 | 0 | 0 | 30 | 0 | 29 |

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Введение в метод ЯМР

Введение в основы метода ядерного магнитного резонанса. Краткая история открытия метода. Ученые внесшие значимый вклад в развитие метода ЯМР и расширение областей его применения. Основные области применения методов магнитного резонанса в химии, биологии и медицине. Измеряемые параметры ЯМР и их связь с молекулярной структурой молекулы.

Тема 2. Основы ЯМР спектроскопия белков

Первые попытки измерения спектров белков. Основные различия между поведением малых и больших молекул. Время корреляции вращательной диффузии молекулы. Зависимость релаксационных параметров от размера молекул и величины магнитного поля. Эффект кольцевых токов и его роль в спектрах ЯМР биомолекул. Стереохимия аминокислотных остатков. Аминокислотная последовательность белка. Первичная, вторичная и третичная структуры белка. Номенклатура IUPAC полипептидной цепи и боковых остатков аминокислот. Обозначения диэдральных углов, атомов и групп. Классификация основных элементов вторичной структуры полипептидных цепей. Спирали (α , β), бетта-листы (параллельные и антипараллельные), β -изгибы. Допустимые конформации аминокислотных остатков.

Тема 3. ЯМР азотистых оснований и нуклеотидов. Приготовление образцов

Азотистые основания, нуклеозиды и нуклеотиды. Фосфодиэфирные связи и образование полинуклеотидной цепи. Рибонуклеиновые кислоты (РНК) и дезоксирибонуклеиновые кислоты (ДНК). Комплементарные основания и образование двойной спирали ДНК. Структурные вариации укладки полинуклеотидной цепи ? А, В и Z-формы. Взаимодействия в биомолекулах. Ван-дер-Ваальсово взаимодействие. Водородная связь. Электростатические взаимодействия. Гидрофобные взаимодействия. Принципы структурной организации биомолекул. Требования, предъявляемые к образцу белка для исследований методом спектроскопии ЯМР. Общие представления о биосинтезе синтезе белка. Экспрессия белков в клеточных и бесклеточных условиях (E.coli, метилотрофы, глицеротрофы, CHO, cell-free system). Среда для выращивания клеток. Источники изотопов ^{15}N , ^{13}C и D. Выделение и очистка белков. Очистка методом аффинной хроматографии на Ni-NTA агарозе. Электрофорез в ПААГ. Методы препаративной ионообменной хроматографии.

Тема 4. Методы 2D спектроскопии

Информация, получаемая из одномерного спектра ЯМР биомолекулы. Методы 2D спектроскопии ? COSY, TOCSY, NOESY и ROESY. Методы гетероядерной корреляции, основанные на детектировании сигналов ^1H - ^{13}C HSQC, HMQC и HMBSC. Методы 2D спектроскопии в изучении небольших белков (<10 кДа). Идентификация типов аминокислотных остатков по спектрам COSY, TOCSY и ^1H - ^{13}C HSQC. Метод последовательного отнесения. Отнесение фрагментов белка, содержащих пролин.

Тема 5. Методы 3D спектроскопии

Методы 3D спектроскопии, основанные на корреляции ядер ^{15}N и ^1H . Сопряжение методик ^1H - ^{15}N HSQC (HMQC) с экспериментами TOCSY, NOESY и ROESY. Методы последовательного отнесения более крупных белков (8-16 кДа). Эксперимент ^1H - ^{15}N HSQC-NOESY-HSQC. 3D эксперименты HNHA и HNHB. Гетероядерные методы ЯМР в изучении белков, меченных изотопами ^{13}C и ^{15}N . Последовательное отнесение белковой цепи на основе экспериментов HNCA, HN(CO)CA, HNCO, HN(CA)CO, HNCACB, CBCA(CO)NH. Методы компьютерного анализа гетероядерных экспериментов. Методы HNHAHB и HBHA(CO)NH для отнесения сигналов ^1H . Методы отнесения боковых заместителей аминокислотных остатков: HCC(CO)NH и HCCN-TOCSY.

Тема 6. Реконструкция структуры из спектров ЯМР

Индекс химических сдвигов и определение вторичной структуры белка. Статистические подходы к определению допустимых значений торсионных углов φ и ψ . Стереоспецифическое отнесение сигналов метиленовых протонов в β -положении и метильных групп остатков валина и лейцина. Определение из экспериментов ЯМР допустимых значений торсионных углов φ , ψ , χ_1 и χ_2 . Анализ спектров NOESY и определение межъядерных расстояний. 4D спектроскопия ЯМР как метод устранения неопределенности в отнесении межъядерных эффектов Оверхаузера. Получение аналогичной информации из 3D спектров ^1H - ^{15}N HSQC-NOESY и ^1H - ^{13}C HSQC-NOESY. Итерационная процедура отнесения ЯЭО в процессе расчета структуры белка. Методы автоматического отнесения ЯЭО в спектрах NOESY. Набор ограничений на межъядерные расстояния и торсионные углы - основа структурных исследований методом ЯМР. Метод дистанционной геометрии в картезианских координатах и пространстве торсионных углов. Классико-механическое описание межъядерных взаимодействий. Вклад дистанционных и торсионных ограничений в полную энергию системы. Методы минимизации энергии. Проблема нахождения глобального минимума. Молекулярной динамика. Метод медленного отжига (simulated annealing) как способ нахождения глобального минимума энергии системы. Основные компьютерные программы, используемые для расчета структуры биомолекул методом ЯМР. Структурные исследования конформационно подвижных пептидов.

Тема 7. Константы спин-спинового и диполь-дипольного взаимодействия

Метод НМВС в идентификации состояния имидазольного кольца гистидина. Изучение констант ионизации карбоксильных групп аспарагиновой и глутаминовой кислоты. Остаточные константы диполь-дипольного взаимодействия, как источник информации об ориентации молекул в магнитном поле. Применение КДДВ для расчета структуры биомолекул.

Тема 8. Способы ориентирования биомолекул в анизотропных средах

Методы определения остаточных констант диполь-дипольного взаимодействия. Способы ориентирования биомолекул в анизотропных средах. Определение ориентации белковых доменов. Скалярные взаимодействия через водородную связь. Эксперименты по измерению констант ^1H JHN и ^1H JHC через одну, две и три связи. Константы через водородную связь в нуклеиновых кислотах, белках и ДНК-белковых комплексах.

Тема 9. Особенности спектров ЯМР нуклеиновых кислот

Особенности спектров ЯМР нуклеиновых кислот. Дисперсия химических сдвигов ^1H . Конформация рибозного фрагмента. Цикл псевдovращения и описание конформационных состояний фуранозы. Видиальные константы спин-спинового взаимодействия ^1H - ^1H и ^31P - ^31P . Методы определения констант спин-спинового взаимодействия в нуклеиновых кислотах. Методы отнесения сигналов в остатках нуклеиновых кислот и методы последовательного отнесения. Стереоспецифическое отнесение сигналов $\text{H}2'$ и $\text{H}2''$, $\text{H}5'$ и $\text{H}5''$.

Тема 10. ЯМР в изучении динамических свойств биомолекул

Распределение частот молекулярных движений. Механизмы релаксации. Диполь-дипольные взаимодействия. Гомоядерный эффект Оверхаузера и его связь с межъядерным расстоянием и динамическими свойствами молекулы. Измерение гетероядерного эффекта Оверхаузера $X\{^1\text{H}\}$. Эксперименты по измерению времен релаксации T_1 и T_2 . Измерение времени релаксации во вращающейся системе координат $T_{1\rho}$. Функция спектральной плотности и методы ее аппроксимации для сферической частицы. Время корреляции вращательной диффузии частицы τ_m . Параметр упорядоченности движения S_2 . Время корреляции внутренних движений τ_e .

Тема 11. Процессы химического обмена

Измерение скорости химического обмена $\text{H} \rightarrow \text{D}$. Определение защитных факторов амидных протонов. Изучение высокоамплитудных процессов раскрытия-закрытия белковой глобулы. Экспериментальное изучение механизма разворачивания белка. Обмен ядер между положениями с различными ламоровыми частотами. "Ring-flipping" и его проявление в биологических системах. Взаимодействия белок-лиганд. Сильное и слабое взаимодействие, медленный и быстрый обмен между связанным и свободным состояниями. Методы изотопной фильтрации и изотопного редактирования в изучении комплексов сильно связанных лигандов. Остаточные КДДВ в определении ориентации белок-лиганд.

Тема 12. ЯМР в изучении молекулярных комплексов

ЯМР в изучении комплексов слабо связываемых лигандов. Методы, основанные на переносе ЯЭО. Перенос кросс-коррелированной релаксации и остаточных КДДВ в равновесии между свободным и связанным состояниями. Методы ЯМР-скрининга в поиске биологически активных соединений. Метод SAR-by-NMR. Методы STD (saturation transfer difference) и WaterLOGSY.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

ЯМР биомолекул: расшифровка структуры белков, нуклеиновых кислот, белок ? лигандные взаимодействия - <http://tulpar.kpfu.ru/enrol/index.php?id=590>

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемому результату обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

- Biological Magnetic Resonance Data Bank - <http://www.bmrb.wisc.edu/>
 James Keeler, Understanding NMR Spectroscopy, University of Cambridge, Department of Chemistry, Published by John Wiley & Sons, 2010 - <http://www-keeler.ch.cam.ac.uk/lectures/index.html>
 Lectures by James Keeler, Understanding NMR Spectroscopy - <http://www-keeler.ch.cam.ac.uk/lectures/index.html>
 Nuclear magnetic resonance spectroscopy of proteins - http://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_magnetic_resonance_spectroscopy_of_proteins
 Protein NMR. A Practical Guide. - <http://www.protein-nmr.org.uk/>
 Structural Biochemistry/Proteins/NMR Spectroscopy - http://en.wikibooks.org/wiki/Structural_Biochemistry/Proteins/NMR_Spectroscopy
 Structure Determination of Proteins with NMR Spectroscopy - <http://www.cryst.bbk.ac.uk/PPS2/projects/schirra/html/home.htm>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

| Вид работ | Методические рекомендации |
|-----------|--|
| лекции | <p>Методические рекомендации при работе над конспектом лекций во время проведения лекции.</p> <p>В ходе лекционных занятий вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в ораторском искусстве. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.</p> <p>В ходе подготовки к семинарам изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, новыми публикациями в периодических изданиях: журналах, газетах и т.д. При этом учесть рекомендации преподавателя и требования учебной программы. Дорабатывать свой конспект лекции, делая в нем соответствующие записи из литературы, рекомендованной преподавателем и предусмотренной учебной программой. Подготовить тезисы для выступлений по всем учебным вопросам, выносимым на семинар.</p> |

| Вид работ | Методические рекомендации |
|---------------------|---|
| лабораторные работы | <p>Задание практической лабораторной работы Объект дипептида для исследования методами спектроскопии ЯМР в практической лабораторной работе выбирается преподавателем, ведущим дисциплину. Подготовка объекта для спектроскопического исследования и работа студента за ЯМР спектрометром проводится совместно с преподавателем. Набор записываемых двумерных корреляционных спектров ЯМР выбирается таким образом, что охватывает основные аспекты изучаемой дисциплины. Обучение анализу двумерных корреляционных спектров ЯМР проводится преподавателем на семинарском занятии.</p> <p>Требования к образцу для спектроскопии ЯМР. Для ЯМР исследования необходимо приготовить предоставленный преподавателем образец дипептида, так чтобы его молярная концентрация в растворе составила 5mM. Расчет навески и концентрации выполняется для стандартной ЯМР ампулы диаметром 5мм и объемом 600мкл исходя из знания молекулярной массы пептида. Используемый в исследовании растворитель: смесь D2O 10%, и H2O 90%.</p> <p>Запись спектров ЯМР. Спектры ЯМР записываются на спектрометре фирмы Bruker Avance III 600, при температуре образца 30С. Приступая к записи спектров ЯМР необходимо:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Установить необходимую температуру образца (30С). 2. Настроить стабилизацию магнитного поля по сигналу ядер дейтерия растворителя. 3. Выполнить настройку добротности датчика (команда atmm). 4. Произвести настройку однородности магнитного поля (topshim gui). 5. Подстроить канал стабилизации сигнала лока: отрегулировать мощность передатчика, коэффициент усиления и фазу сигнала. 6. Выполнить калибровку 900-импульса (команда pulsecal). 7. Отрегулировать подавление сигнала воды путем подбора оптимального значения несущей частоты (значение параметра o1p, с использованием команды gs). 8. Перед записью нового спектра ЯМР выполнять процедуру подбора коэффициента усиления приемника (значение параметра rg, запуская команду rga). 9. Записать одномерный спектр ЯМР с подавлением воды. Число накоплений ns=16. 10. Записать двумерные гомо-корреляционные спектры 1H-1H-COSY и 1H-1H-TOCSY. Число накоплений ns=2. Разрешение спектров установить 2048 на 256. 11. Записать двумерные гетеро-корреляционные спектры 1H-13C-HSQC и 1H-13C-HMBC. Число накоплений ns=8. Разрешение спектров установить 2048 на 256. 12. Для преобразования сигнала ССИ в спектр ЯМР использовать команду fr - для одномерного спектра и xfb - всех для двумерных спектров. 13. Сконвертировать полученные спектры в файлы формата pdf используя возможности программы Topsrpn, которые в дальнейшем использовать для анализа и отнесения сигналов, а также для составления отчета. <p>Лабораторная практическая работа должна быть оформлена последовательно, грамотно и разборчиво. При возникновении вопросов по оформлению лабораторной практической работы студенту следует обращаться за консультацией преподавателю. Время, отведенное на выполнение контрольной работы, определяется преподавателем. По окончании отведенного на выполнение отчет по лабораторной практической работе сдается преподавателю для проверки.</p> |

| Вид работ | Методические рекомендации |
|------------------------|--|
| самостоятельная работа | <p>Самостоятельная работа студентов является одной из основных форм внеаудиторной работы при реализации учебных планов и программ.</p> <p>Самостоятельная работа это познавательная учебная деятельность, когда последовательность мышления ученика, его умственных и практических операций и действий зависит и определяется самим студентом. Студент в процессе обучения должен не только освоить учебную программу, но и приобрести навыки самостоятельной работы. Студенту предоставляется возможность работать во время учебы более самостоятельно, чем учащимся в средней школе. Студент должен уметь планировать и выполнять свою работу.</p> <p>Целью самостоятельной работы студентов является овладение фундаментальными знаниями, профессиональными умениями и навыками деятельности по профилю, опытом творческой, исследовательской деятельности.</p> <p>Самостоятельная работа студентов способствует развитию самостоятельности, ответственности и организованности, творческого подхода к решению проблем учебного и профессионального уровня.</p> <p>Самостоятельная работа студентов является обязательным компонентом учебного процесса для каждого студента и определяется учебным планом. Формы самостоятельной работы студентов определяются при разработке рабочих программ и учебных методических комплексов дисциплин содержанием учебной дисциплины.</p> <p>Согласно Положения об организации самостоятельной работы студентов на основании компетентностного подхода к реализации профессиональных образовательных программ, видами заданий для самостоятельной работы являются:</p> <ul style="list-style-type: none"> - для овладения знаниями: чтение текста (учебника, первоисточника, дополнительной литературы), составление плана текста, графическое изображение структуры текста, конспектирование текста, выписки из текста, работа со словарями и справочниками, ознакомление с нормативными документами, учебно-исследовательская работа, использование аудио- и видеозаписей, компьютерной техники и Интернета и др. - для закрепления и систематизации знаний: работа с конспектом лекции, обработка текста, повторная работа над учебным материалом (учебника, первоисточника, дополнительной литературы, аудио и видеозаписей, составление плана, составление таблиц для систематизации учебного материала, ответ на контрольные вопросы, заполнение рабочей тетради, аналитическая обработка текста (аннотирование, рецензирование, реферирование, конспект-анализ и др), завершение аудиторных практических работ и оформление отчетов по ним, подготовка мультимедиа сообщений/докладов к выступлению на семинаре (конференции), материалов-презентаций, подготовка реферата, составление библиографии, тематических кроссвордов, тестирование и др. - для формирования умений: решение задач и упражнений по образцу, решение вариативных задач, выполнение чертежей, схем, выполнение расчетов (графических работ), решение ситуационных (профессиональных) задач, подготовка к деловым играм, проектирование и моделирование разных видов и компонентов профессиональной деятельности, опытно экспериментальная работа, рефлексивный анализ профессиональных умений с использованием аудио- и видеотехники и др. <p>Самостоятельная работа может осуществляться индивидуально или группами студентов в зависимости от цели, объема, конкретной тематики самостоятельной работы, уровня сложности, уровня умений студентов.</p> |
| экзамен | <p>Изучение дисциплины завершается экзаменом. Подготовка к экзамену способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к экзамену, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На экзамене студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине.</p> <p>За 3-4 дня нужно систематизировать уже имеющиеся знания. На консультации перед экзаменом студентов познакомят с основными требованиями, ответят на возникшие у них вопросы. Поэтому посещение консультаций обязательно.</p> <p>Залогом успешной сдачи экзамена являются систематические, добросовестные занятия обучающегося на протяжении всего периода обучения. Однако это не исключает необходимости специальной работы непосредственно перед сдачей экзамена.</p> |

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

Специализированная лаборатория.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 03.04.02 "Физика" и магистерской программе "Медицинская физика".

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика
Профиль подготовки: Медицинская физика
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский
Год начала обучения по образовательной программе: 2024

Основная литература:

1. Ремизов, А. Н. Медицинская и биологическая физика : учебник / А. Н. Ремизов. - 4-е изд., испр. и перераб. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2023. - 656 с. - ISBN 978-5-9704-7498-3. - Текст : электронный // ЭБС 'Консультант студента' : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970474983.html> (дата обращения: 15.01.2024). - Режим доступа: по подписке.
2. Сергеев Н.А., Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса: монография / Н.А. Сергеев, Д.С. Рябушкин - М.: Логос, 2017. - 272 с. - ISBN 978-5-98704-754-5. - Текст: электронный // ЭБС 'Консультант студента': [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785987047545.html> (дата обращения: 15.01.2024). - Режим доступа: по подписке.
3. Основы ядерного магнитного резонанса : учебное пособие / М.П. Евстигнеев, А.О. Лантушенко, В.В. Костюков [и др.]. - Москва : Вузовский учебник : ИНФРА-М, 2022. - 247 с. - ISBN 978-5-9558-0414-9. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1858556> (дата обращения: 15.01.2024). - Режим доступа: по подписке.

Дополнительная литература:

1. Северин Е.С. Биохимия: учебник / под ред. Е. С. Северина. - 5-е изд., испр. и доп. - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2016. - 768 с. - ISBN 978-5-9704-3762-9. - Текст: электронный // ЭБС 'Консультант студента' : [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970437629.html> (дата обращения: 15.01.2024). - Режим доступа: по подписке.
2. Каратаева, Фаида Хайдаровна. Спектроскопия ЯМР в органической химии: учебное пособие / Ф. Х. Каратаева, В. В. Ключков. - Казань: Казанский университет, 2013. - 21. Ч. 1: Общая теория ЯМР. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C . - 2013. - 129 с. - Текст: электронный. - URL: https://kpfu.ru/docs/F1780836038/NMR_spectroscopy_1_new.pdf (дата обращения: 15.01.2024). - Режим доступа: по подписке.
3. Ефимов, С. В. Пространственное строение биологически активных пептидов в растворах и в комплексе с модельной мембраной по данным двумерных методов спектроскопии ЯМР : автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук: специальность 01.04.07 - Физика конденсированного состояния / Ефимов Сергей Владимирович ; [Каф. общ. физики, Лаб. ЯМР Ин-та физики Казан. (Приволж.) федер. ун-та]. - Электронные текстовые данные (1 файл: 1385 Кбайт) .- (Казань, 2013). - Загл. с экрана. - Библиогр.: с. 22-23 (16 назв.). - Текст: электронный. - URL: <http://libweb.kpfu.ru/z3950/referat/2013-052.pdf> (дата обращения: 15.01.2024). - Режим доступа: открытый.
4. Усачев, К. С. Пространственное строение амилоидогенных A β пептидов и их комплексов с модельными мембранами в растворах методами спектроскопии ЯМР : автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук: специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния / Усачев Константин Сергеевич; Федер. гос. авт. образоват. учреждение высш. проф. образования 'Казан. (Приволж.) федер. ун-т', [Каф. общ. физики, Лаб. ЯМР Ин-та физики]. - Электронные данные (1 файл: 1532 Кб). - (Казань, 2013). - Загл. с экрана. - Текст: электронный. - URL: <http://libweb.kpfu.ru/z3950/referat/2013-194.pdf> (дата обращения: 15.01.2024). - Режим доступа: открытый.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.08.02 Ядерный магнитный резонанс биологических
объектов

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Медицинская физика

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2024

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. 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, учебно-методические комплексы, 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 образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. 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 обучающимся. Многопрофильный образовательный ресурс "Консультант студента" является электронной библиотечной системой (ЭБС), предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Полностью соответствует требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования к комплектованию библиотек, в том числе электронных, в части формирования фондов основной и дополнительной литературы.