


Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра молекулярної і медичної біофізики

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Декан факультету радіофізики,
біомедичної електроніки та
комп'ютерних систем


Сергій ШУЛЬГА
2024 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

МАС-СПЕКТРОМЕТРІЯ

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти другий (магістерський)
галузь знань 10 – Природничі науки
(шифр і назва)
спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали
(шифр і назва)
освітня програма Біофізика
(шифр і назва)
спеціалізація _____
(шифр і назва)
вид дисципліни за вибором
(обов'язкова / за вибором)
факультет радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

2024 / 2025 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

24 червня 2024 року, протокол № 6

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: Косевич Марина Вадимівна, д. ф.-м. н., професор кафедри молекулярної і медичної біофізики

Програму схвалено на засіданні кафедри молекулярної і медичної біофізики факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна

Протокол від 24 червня 2024 року № 6

Завідувач кафедри молекулярної і медичної біофізики



Берест В.П.

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми:

Біофізика

Гарант освітньо-професійної програми Біофізика



Берест В.П.

Програму погоджено науково-методичною комісією факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

Протокол від 24 червня 2024 року № 6

Голова науково-методичної комісії факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем



Бутрим О.Ю.

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «**Мас-спектрометрія**» складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки

магістрів, другий (магістерський) рівень вищої освіти

(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

Спеціальності 105 Прикладна фізики та наноматеріали

1. Опис навчальної дисципліни

- 1.1. **Метою викладання навчальної дисципліни** є освоєння фундаментальних основ та техніки експерименту сучасного методу молекулярно-біофізичних досліджень – мас-спектрометрії, опанування методів обробки та інтерпретації експериментальних даних, ознайомлення з колом наукових проблем, які вирішуються за допомогою мас-спектрометрії.
- 1.2. **Основними завданнями вивчення дисципліни** є надання обсягу знань з теоретичних основ та техніки експерименту мас-спектрометрії, необхідного для планування і проведення експериментів та інтерпретації мас-спектрів; засвоєння методів отримання інформації стосовно фізико-хімічних властивостей біомолекул та методології застосування цього методу до вирішення біофізичних та медико-біологічних проблем.

Основними завданнями вивчення дисципліни є сформувати у здобувачів вищої освіти наступні загальні та фахові компетентності.

Загальні:

K01. Здатність до абстрактного та системного мислення, аналізу та синтезу.

K02. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

K03. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

K12. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово.

K17. Здатність до неординарного творчого мислення, креативність, здатність до системного мислення, здатність до науково-дослідної діяльності.

K18. Здатність застосовувати теоретичні знання у практичних ситуаціях.

K19. Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації з різних джерел.

Фахові компетентності:

K22. Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної теоретичної та прикладної фізики.

K23. Здатність використовувати на практиці базові знання з математики як математичного апарату фізики при вивченні та дослідженні фізичних явищ і процесів.

K27. Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації.

K30. Орієнтація на найвищі наукові стандарти – обізнаність щодо фундаментальних відкриттів та теорій, які суттєво вплинули на розвиток фізики та інших природничих наук.

K31. Здатність здобувати додаткові компетентності через вибіркові складові освітньої програми, самоосвіту, неформальну та інформальну освіту.

1.3. Кількість кредитів - 6

1.4. Загальна кількість годин - 180

1.5. Характеристика навчальної дисципліни

Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	-й
Семестр	
2-й	-й
Лекції	
32 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
32 год.	год.
Лабораторні заняття	
год.	год.
Самостійна робота	
116 год.	год.
Індивідуальні завдання	
год.	год.
Контрольні роботи	
год.	год.

1.6. Заплановані результати навчання

Згідно з вимогами освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми, студенти мають досягти таких результатів навчання:

знати: фізичні принципи методу мас-спектрометрії, будову мас-спектрометричної експериментальної установки, методи іонізації/десорбції органічних молекул, типи мас аналізаторів, методи ручної та комп'ютерної обробки та інтерпретації мас-спектрів, досягнення мас-спектрометрії у вирішенні молекулярно-біофізичних та біомедичних проблем та перспективи подальшого розвитку методу.

вміти: здійснювати інтерпретацію мас-спектрів та на її основі робити ідентифікацію біомолекул, проводити розрахунки ізотопних співвідношень, планувати мас-спектрометричні експерименти для встановлення фізичних параметрів міжмолекулярних взаємодій біомолекул, розробляти мас-спектрометричні методики для біомедичних аналітичних застосувань, отримувати інформацію стосовно фізико-хімічних та структурних параметрів біомолекул з відповідної спеціалізованої мас-спектрометричної літератури.

2. 2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Фізичні основи та техніка мас-спектрометричного експерименту

Тема 1. Історія розвитку та основні поняття мас-спектрометрії

Зміст. Предмет мас-спектрометрії. Історія винаходу та розвитку. Ключові поняття: фізичні величини, що вимірюються. Поняття маси. Одиниці вимірювання маси. Будова атома, дефект маси. Інформація про хімічні елементи, що міститься у таблиці Менделєєва. Ізотопи, ізотопні співвідношення, внесок мас-спектрометрії у ядерно-фізичні дослідження. Електронні параметри атомів та молекул: енергія (потенціал) іонізації, спорідненість до електрона. Принципова схема мас-спектрометра.

Тема 2. Методи іонізації/десорбції молекул

Зміст. Методи іонізації/десорбції атомів та молекул як приклад розвитку наукової думки – історія створення, класифікація, фізичні принципи. Сучасні науковці, які вирішували проблему переведення біомолекул до газової фази; внесок українських науковців з Києва, Харкова, Сум. Внесок науковців Харківського національного університету у розвиток вторинно-емісійної мас-спектрометрії та ФТІНТ НАНУ у розвиток польової іонізації та польової десорбції, низькотемпературної мас-спектрометрії. Нобелівська премія за розробку мас-спектрометричних методів дослідження біополімерів (матрично-активована лазерна десорбція/іонізація, електророзпилення розчинів. Джерела іонів – принципові схеми, принципи роботи.

Тема 3. Мас-аналізатори.

Зміст. Методи розділення молекул за співвідношенням їх маси до заряду. Види мас-аналізаторів, вади та переваги, сфери застосування. Фізичні принципи, історія розробки. Ідеальний мас-аналізатор – факт чи фікція? Історія успіху – створення мас-аналізатору «Орбітреп». Тандемна мас-спектрометрія (МСⁿ). Гігантські та мініатюрні мас-аналізатори. Історія наукового приладобудування в Україні: інженерні розробки ФТІНТ НАНУ, історія виробничого об'єднання «Електрон»/«SELMІ» (Суми). Огляд сучасних фірм – виробників мас-спектрометричного обладнання.

Тема 4. Будова мас-спектрометричного приладу (лекція у лабораторії)

Зміст. Загальна будова мас-спектрометричної установки з демонстрацією лабораторного приладу у мас-спектрометричній лабораторії біофізичного відділу ФТІНТ НАНУ. Системи вводу зразку. Поєднання мас-спектрометра з іншими аналітичними приладами – газовим та рідинним хроматографами (ГХ/МС, РХ/МС). Система отримання вакууму. Електронні керуючі блоки. Поєднання мас-спектрометра з керуючим комп'ютером. Детектори іонів. Система реєстрації та обробки даних. Пробопідготовка для аналізу.

Розділ 2. Інтерпретація мас-спектрометричних даних

Тема 5. Обробка та інтерпретація мас-спектрів.

Зміст. Вигляд типових мас-спектрів. Одиниці представлення маси молекул. Одиниці вимірювання інтенсивності іонного струму. Базові прийоми обробки оригінальних мас-спектрів. Калібрування шкали мас. Діапазон мас. Поняття чутливості та роздільної здатності приладу. Можливості, що надає мас-спектрометрія з високою роздільною здатністю: встановлення бруто-формули речовини. Типи молекулярних іонів. Молекулярні іон-радикали. Протоновані молекули. Катіонізовані молекули. Позитивні та негативні іони. Багатозарядні іони. Стабільні та метастабільні іони. Фрагментація молекулярних іонів – фізичні засади.

Тема 6. Базові правила фрагментації основних класів органічних сполук

Зміст. Базові правила інтерпретації мас-спектрів відомих та невідомих сполук. Аналіз групи піків молекулярного іону. Бруто-формула. Встановлення елементного складу іонів на базі ізотопного розподілу піків. Азотне правило. Концепції локалізації заряду та

неспареного електрону у іонах. Закономірності фрагментації основних класів органічних сполук: аліфатичні вуглеводні, спирти, кетони, альдегіди, кислот, ароматичні сполуки. Бібліотеки мас-спектрів.

Тема 7. Особливості інтерпретації мас-спектрів біомолекул.

Зміст. Особливості інтерпретації мас-спектрів біомолекул, отриманих за допомогою різних методів іонізації; взаємодоповнення даних. Стабільність біомолекул в газовій фазі. Використання тандемної мас-спектрометрії для встановлення структури органічних та біомолекул. Прийоми дисоціації, індукованої зіткненнями. Дослідження молекулярно-біологічних процесів у режимі реального часу.

Розділ 3. Застосування мас-спектрометрії до вирішення біофізичних та медико-біологічних проблем

Тема 8. Основи протеоміки. Дослідження властивостей білків у газовій фазі.

Зміст. Визначення протеоміки: предмет та задачі. Мас-спектри мономерів білків – амінокислот. Мас-спектри пептидів. Мас-спектри білків. Рівні структурної організації білків: первинна, вторинна, третинна, четвертинна структури. Мас-спектрометрія ультра-високих мас. Багатозарядні іони білків. Принципові питання переведення біополімерів до газової фази. Питання стабільності білкових молекул у газовій фазі. Визначенні конформації білків у газовій фазі: прийом дейтерозаміщення. Мас-спектрометрія іонної рухливості для встановлення конформації.

Тема 9. Застосування мас-спектрометрії у протеомних дослідженнях

Зміст. Визначальна роль мас-спектрометрії у бурхливому становленні протеоміки. Використання даних стосовно фрагментації білків для встановлення їх первинної структури. Номенклатура пептидних фрагментів Ропсторфа та Бимана. Секвенування пептидів. Прийоми «зверху вниз» та «знизу догори» для ідентифікацій білків. Біофізичні дослідження взаємодії/асоціації білків. Сучасні пошукові методи протеоміки. Обробка великих масивів даних, застосування новітніх комп'ютерних та інформаційних технологій. Розробка прийомів кількісного протеомного аналізу.

Тема 10. Мас-спектрометричний іміджинг (візуалізація)

Зміст. Основи іміджингових технологій. Мас-спектрометричні методики іміджингу з використанням вторинно-емісійної та лазерно-десорбційної мас-спектрометрії. Інформація стосовно розподілу іонів, молекул, біополімерів у біологічних об'єктах – клітинах, зрізах тканин, рослинах, мікроскопічних організмах. Перспективні дослідження зляжисних новоутворень на основі аналізу розподілу біомаркерів у здорових та зляжисних тканинах.

Тема 11. Застосування мас-спектрометрій у медико-біологічних дослідженнях

Зміст. Приклади використання мас-спектрометрії до медичних аналізів на молекулярному рівні. Діагностика амінокислотного профілю новонароджених. Діагностика за аналізом складу видихаємого повітря. Пошук біомаркерів онкологічних захворювань.

Нові напрямки в нейрохімії. Розробка новітніх приладів для *on line* контролю під час хірургічних втручань.

Тема 12. Біомедичні, екологічні, космічні дослідження

Зміст. Геноміка, метаболоміка, ліпідоміка. Розробка мініатюрних мобільних мас-спектрометричних приладів для екологічного контролю (забруднювачі, токсичні викиди при катастрофах). Розробка методів експрес-ідентифікації патогенних мікроорганізмів. Мас-спектрометрія у космічних дослідженнях. Аналіз складу метеоритів у земних умовах для пошуку органічних речовин у рамках проблеми походження життя. Ксенобіотики. Мас-спектрометричні прилади для установки на космічних апаратах. Застосування мас-спектрометрії у криміналістиці, виявленні наркотиків та вибухових речовин.

Тема 13. Біофізика нуклеїнових кислот та мас-спектрометрія

Зміст. Будова нуклеїнових кислот, рівні структурної організації. Гідратація та денатурація ДНК. Характеристичні мас-спектри азотних основ, нуклеозидів, нуклеотидів, олігонуклеотидів, синтетичних та нативних ДНК та РНК, отримані за допомогою різних методів іонізації/десорбції. Кореляції між біофізичними спектроскопічними дослідженнями плавлення ДНК та мас-спектрометричними експериментами методом електророзпилення для моделювання цього процесу. Внесок науковців ФТІНТ НАНУ: розробка методу температурно-залежної польової мас-спектрометрії для вимірювання термодинамічних параметрів невалентних міжмолекулярних взаємодій азотних основ, азотних основ з водою (гідратація), амінокислотами (білково-нуклеїнове розпізнавання), протипухлинними препаратами (молекулярні механізми хіміотерапії). Вимірювання потенціалів іонізації азотних основ. Нуклеїнові кислоти у газовій фазі.

Тема 14. Низькотемпературна мас-спектрометрія, кріобіофізика та фізика кластерів

Зміст. Низькотемпературна мас-спектрометрія: фізичні принципи та приборне втілення. Розвиток вторинно-емісійної низькотемпературної мас-спектрометрії у ФТІНТ НАНУ. Фазові діаграми води та водних розчинів, кріопротектори. Приклади вирішення проблем кріобіофізики за допомогою низькотемпературної мас-спектрометрії. Фізика кластерів у зв'язку з моделюванням не валентної асоціації біомолекул і біологічно активних речовин.

Тема 15. Застосування мас-спектрометрії у фармакології, нанотехнології, нанобіофізиці

Зміст. Застосування мас-спектрометрії у фармакології: ідентифікація фармпрепаратів, промисловий контроль. Фундаментальні дослідження молекулярних механізмів дії фармакологічних препаратів. Мас-спектрометрія для вирішення нанотехнологічних задач та нанотехнологій для розвитку техніки мас-спектрометричних експериментів. Внесок науковців ФТІНТ НАНУ, ІХП НАНУ.

Тема 16. Заключний огляд курсу

Зміст. Узагальнення лекційних матеріалів. Література з мас-спектрометричної тематики. Спеціалізовані наукові журнали з мас-спектрометрії. Науково-організаційні питання. Наукові мас-спектрометричні товариства, наукові конференції та школи. Інтернет-ресурси.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	Денна форма						Заочна форма					
	Усього	у тому числі					Усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	с.р.		л	п	лаб	інд	ср
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Фізичні основи та техніка мас-спектрометричного експерименту												
Тема 1. Історія розвитку та основні поняття мас-спектрометрії.	4	2	2			10						
Тема 2. Методи іонізації/десорбції молекул.	4	2	2			8						
Тема 3. Мас-аналізатори.	4	2	2			6						
Тема 4. Будова мас-спектрометричного приладу.	4	2	2			8						
Разом за розділом 1	16	8	8			32						
Розділ 2. Інтерпретація мас-спектрометричних даних												
Тема 5. Обробка та інтерпретація мас-спектрів.	4	2	2			14						
Тема 6. Базові правила фрагментації основних класів органічних сполук.	4	2	2			14						
Тема 7. Особливості інтерпретації мас-спектрів біомолекул.	4	2	2			10						
Разом за розділом 2	12	6	6			38						
Розділ 3. Застосування мас-спектрометрії до вирішення біофізичних та медико-біологічних проблем												
Тема 8. Основи протеоміки. Дослідження властивостей білків у газовій фазі.	4	2	2			6						
Тема 9. Застосування мас-спектрометрії у протеомних дослідженнях.	4	2	2			6						
Тема 10. Мас-спектрометричний іміджинг (візуалізація).	4	2	2			6						
Тема 11. Застосування мас-спектрометрій у	4	2	2			8						

медико-біологічних дослідженнях.													
Тема 12. Біомедичні, екологічні, космічні дослідження.	4	2	2			6							
Тема 13. Біофізика нуклеїнових кислот та мас-спектрометрія.	4	2	2			4							
Тема 14. Низькотемпературна мас-спектрометрія, кріобіофізика та фізика кластерів.	4	2	2			4							
Тема 15. Застосування мас-спектрометрії у фармакології та нанотехнології.	4	2				4							
Тема 16. Заключний огляд курсу.	4	2	2			2							
Разом за розділом 3	34	18	18			46							
Усього годин	180	32	32			116							

4. Теми семінарських занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Перегляд та обговорення матеріалів з Інтернет стосовно історії та сучасних можливостей методу мас-спектрометрії	4
2	Розрахунок ізотопних розподілів поліізотопних сполук, освоєння відповідного програмного забезпечення	2
3	Ознайомлення з мас-спектрометричною технікою у лабораторних умовах	2
4	Практичні заняття з обробки та інтерпретації мас-спектрів органічних сполук та біомолекул	6
5	Освоєння методик підготовки проб для мас-спектрометричних досліджень	2
6	Знайомство з сучасними мас-спектрометричними приладами за матеріалами презентацій фірм-виробників мас-спектрометричної техніки	4
7	Мас-спектрометрія біополімерів та фармакологічних препаратів	2
8	Мас-спектрометричний іміджинг; порівняння з візуалізацією іншими методами	2
9	Розбір оригінальних базових статей з біомедичної мас-спектрометрії, надрукованих у закордонних журналах	4
10	Обговорення матеріалів реферативних оглядів, виконаних студентами за заданими темами	4
	Разом	32

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин	Форма контролю
1	Дослідження історії розвитку методу мас-спектрометрії (за матеріалами історичних оглядів)	8	Перевірка домашніх завдань, поточне тестування, залік
2	Розрахунок ізотопних співвідношень, пошук та порівняння можливостей сучасних комп'ютерних програм	8	Перевірка графічної розрахункової роботи, залік
3	Контрольна робота 1	2	10 балів
4	Обробка та аналіз мас-спектрів органічних сполук та біомолекул	10	Перевірка домашніх завдань, поточне тестування, залік
5	Аналіз будови різноманітних мас-спектрометричних приладів за матеріалами фірм-виробників експериментальної техніки	6	Перевірка домашніх завдань, поточне тестування, залік
6	Контрольна робота 2	2	10 балів
7	Медико-біологічні застосування мас-спектрометрії – аналіз літератури та матеріалів з Інтернет	10	Перевірка домашніх завдань, поточне тестування, залік
8	Іміджинг та візуалізація біоматеріалу за допомогою мас-спектрометричних та спектроскопічних методик	6	Перевірка домашніх завдань, поточне тестування, залік
9	Аналіз актуальних оглядів з мас-спектрометричної тематики, опублікованих у закордонних журналах	10	Перевірка домашніх завдань, тестування знання змісту оглядів, залік
10	Контрольна робота 3	2	10 балів
11	Пошук та перегляд Інтернет-ресурсів з демонстрацією роботи сучасних мас-спектрометричних приладів	12	Перевірка домашніх завдань, вибіркового перегляд Інтернет-ресурсів, залік
12	Підготовка презентаційних матеріалів для виступів на семінарах та практичних заняттях	10	Поточне тестування, залік
13	Написання реферативного огляду за заданою тематикою, оформлення мультимедійної презентації, підготовка до виступу, виступ	30	Представлення та захист реферату на відкритому семінарі
	Разом	116	

6. Індивідуальні завдання

Реферативна робота (30 год. самостійної роботи)

№ етапу	Найменування етапу
1.	Вибір теми роботи у співпраці із викладачем. Аналіз предметної області та ознайомлення з літературними джерелами.
2.	Постановка задачі. Вибір і обґрунтування методу розв'язання.
3.	Аналіз вивчених літературних даних.
4.	Написання тексту реферату та створення мультимедійної презентації.
5.	Коригування тексту і змісту презентації після перевірки керівником змісту, опису результатів, оформлення посилань і запозичень із метою запобігання плагіату.
6.	Представлення реферату на відкритому семінарі із використанням мультимедійної презентації.

Орієнтовні теми рефератів

1. Таблиця Менделєєва та мас-спектрометрія
2. Ізотопна мас-спектрометрія та ізотопний аналіз
3. Манхеттенський проект та роль мас-спектрометрії
4. Нобелівської премії у наукових галузях, пов'язаних з мас-спектрометрією
5. Орбітреп – історія успіху
6. Біомедицинські застосування мас-спектрометрії
7. Застосування сучасних методів мас-спектрометрії в протеомних дослідженнях
8. Мас-спектрометричні методики, які використовуються для аналізу біомолекул
9. Застосування мас-спектрометрії до аналізу об'єктів оточуючого середовища
10. Застосування мас-спектрометрії у космічних дослідженнях
11. Візуалізація (іміджинг) біооб'єктів на молекулярному рівні
12. Застосування мас-спектрометрії у фармакології та криміналістиці

Студенти заохочуються до вибору індивідуальних тем робіт з урахуванням порад викладача.

7. Методи контролю

Самоконтроль здійснюється студентами при виконанні завдань для самопідготовки та самоконтролю по кожному розділу курсу.

Поточний контроль знань студентів включає поточне експрес-опитування, дві контрольні роботи, перевірку виконання домашніх завдань, представлення презентацій та рефератів.

Підсумковий семестровий контроль проводиться у формі заліку і передбачає письмову відповідь на поставлені питання та їх усну доповідь.

8. Схема нарахування балів

Умовою допуску до заліку є виконання всіх домашніх завдань, що виносяться на практичні заняття, оцінених на позитивну оцінку, та виконання двох контрольних робіт з оцінкою не нижче 3. Умовою також є виконання реферативної роботи та її електронної презентації, захист реферату на семінарі (максимум 15 балів).

Заліковий білет складається з 4 питань; вичерпна відповідь на перше оцінюється в 4 бали, на три наступні зараховується як 12 балів, що дає в сумі максимальні 40 балів за залік. Часткова відповідь на кожне питання знижує максимальну оцінку до меншої кількості балів пропорційно тому, яку частину від повної відповіді на це питання містить письмова робота студента та її усне викладення.

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання						Залік	Сума балів
Оцінка виконання домашніх завдань та самостійних робіт Розділ 1-3	Контрольна робота №1	Результати опитування та тестування впродовж практичних занять Розділ 1-3	Контрольна робота №2	Індивідуальне завдання (реферативна робота)	Разом		
T1-T15	Розділ 1	T1-T15	Розділ 2	T1-T15	T1-T16	T1-T16	
18	5	17	5	15	60	40	100

T1, T2 ... – теми розділів.

Схема нарахування балів за контрольну роботу. Контрольні роботи №1 та №2, в яких перевіряються теоретичні знання та практичні навички обробки та інтерпретації мас-спектрів і розрахунків ізотопних співвідношень у молекулярних іонах біомолекул, оцінюються за п'ятибальною шкалою. Вичерпна відповідь на кожне завдання зараховується як 5 балів. Часткова відповідь на кожне питання знижує максимальну оцінку з 5 балів до меншої кількості балів пропорційно тому, яку частину від повної відповіді на це питання містить виконана робота студента, або пропорційно кількості суттєвих помилок у роботі студента.

За **виконання домашніх завдань** студент отримує максимальні 3 бали, якщо результати належно оформлені і студент вичерпно відповів на 70% питань. Якщо студент дав відповіді менше ніж на 30% питань або результати оформлені неналежним чином, тоді робота повинна бути здана повторно.

Реферативна робота

Пояснювальна записка (друкований текст реферату)	Ілюстративна частина, мультимедійна презентація	Захист роботи на семінарі, доповідь, відповіді на запитання за темою роботи, участь у семінарській дискусії	Сума
до 5	до 5	до 5	15

Три складові частини реферативної роботи оцінюються окремо за критеріями традиційної п'ятибальної системи, але робота виносить на повторний захист, якщо хоча б одна із частин набрала менше 2 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно	зараховано
70 - 89	добре	
50 - 69	задовільно	
1 -49	незадовільно	не зараховано

9. Рекомендована література

Основна література

1. Kaltashov I.A. Mass spectrometry in structural biology and biophysics: architecture, dynamics, and interaction of biomolecules / I.A. Kaltashov, S.J. Eyles Edts, 2nd edition – Hoboken: John Wiley, 2012. – 289 p.
2. Gross J.H. Mass spectrometry. *A Textbook*. 3rd edition. – Springer, 2017. – 968 p.

Допоміжна література

1. Косевич М.В., Шелковський В.С. Прогрес техніки біомедицинського мас-спектрометричного експерименту як приклад впливу потреб суспільства на розвиток науки // Вісник Харківського університету N 497, Біофізичний вісник, вип. 2. - 2000. - С. 84-99.
2. Покровський В.О. Десорбційна мас-спектрометрія: фізика, фізична хімія, хімія поверхні // Вісник НАН України. – 2012. №12. – С. 28-49.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. <http://www.spectroscopynow.com> – безкоштовний сайт спектроскопічного товариства, який містить розділ Base Peak присвячений мас-спектрометрії <http://www.wiley.com/legacy/wileychi/ms/msi/mscom.html>
2. http://www.asms.org/whatisms/page_index.html - Сайт Американського мас-спектрометричного товариства; сторінка з питаннями-відповідями для починаючих користувачів
3. www.ionsource.com -- інформаційний сайт з корисними посиланнями з мас-спектрометрії
4. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/> - пошукова машина публікацій з біомедичної тематики
5. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/home/literature/> - пошукова машина публікацій
6. <https://webbook.nist.gov/chemistry> - пошуковик Національного інституту стандартів та технологій

Курси для дистанційного навчання

<https://www.chromacademy.com/channels/gc-ms-training-courses/>
<https://www.chromacademy.com/channels/lc-ms-training-courses/>

Контрольні питання з навчальної дисципліни «Мас-спектрометрія»

Розділ 1. Основи мас-спектрометрії

1. Історія формування наукових уявлень про атомну будову речовини, молекули та масу.
2. Одиниці вимірювання маси атомів і молекул.
3. Розподільна здатність мас-спектрометрів і способи її визначення.
Мас-спектрометрія високої розподільної здатності.
4. Що таке дефект маси, значення цього ефекту для мас-спектрометричних вимірювань.
5. Що таке ізотопи. Розрахунок ізотопних розподілів для поліізотопних сполук.
6. Стабільні та радіоактивні ізотопи. Роль мас-спектрометрії у Манхеттенському проєкті.
7. Фізичний сенс наступних визначень мас молекул: номінальна, моноізотопна, середня маса.
8. Ізотопи. Ізотопна мас-спектрометрія, приклади застосування ізотопного аналізу в різних галузях природничих наук (в геохронології, палеонтології, космохімії, біології, мікробіології, сільському господарстві).
9. Які види іонів реєструються у мас-спектрах? Молекулярні та фрагментні іони.
10. Дайте опис загального виду мас-спектра: які величини відкладаються по осях координат і одиниці їх вимірювання; види іонів, що реєструються у мас-спектрі.
11. Детектори іонів. Аналогова та цифрова реєстрація іонного струму. Динамічний діапазон.
12. Стабільність іонів. Довжина вільного пробігу. Фізичний зміст перерізу зіткнень, ефективний переріз іонізації.
13. Інтерпретація мас-спектрів. Основні закономірності фрагментації органічних сполук.

Розділ 2. Техніка мас-спектрометричного експерименту

1. Намалюйте принципову схему мас-спектрометричної установки.
2. Назвіть основні типи мас-аналізаторів.
3. Магнітні мас-аналізатори. Принцип розділення іонів за масами у магнітних мас-аналізаторах.
4. Часопролітні (time-of-flight, TOF) мас-аналізатори. Принцип дії. Мас-рефлектрон.
5. Мас-спектрометри з подвійним фокусуванням (тандемні, МС/МС). Устрій, для чого використовуються.
6. Мас-спектрометрична установка “потрійний квадруполь” (triple quadrupole). Принципова схема, для чого використовується.
7. Метод іонізації речовини електронним ударом (електронна іонізація). Фізичні принципи, конструкція джерела іонів, галузі застосування.
8. Перелічити основні методи іонізації/десорбції речовини, що використовуються для аналізу біомолекул. Різноманіття фізичних принципів у основі винайдених методів іонізації/десорбції.
9. Десорбційні методи в мас-спектрометричному аналізі: вторинно-іонна мас-спектрометрія, лазерна десорбція, матрично-активована лазерна десорбція. Фізичні принципи, галузі використання.
10. Метод іонізації електророзпиленням розчинів (electrospray). Історія винаходу, Нобелівська премія, переваги (перед іншими методами) у дослідженнях біомолекул.
11. За що саме винахід мас-спектрометричних методик з електророзпиленням розчинів (електроспрей, electrospray) і матрично-активованою лазерною десорбцією/іонізацією (МАЛДІ, MALDI) було відмічено Нобелівською премією?
12. Проблеми переводу термічно нестабільних біомолекул до газової фази і знайдені способи їх подолання.
13. Способи введення речовини (зразків) у мас-спектрометричну установку. Сполучення

мас-спектрометрів з хроматографами (хромато-мас-спектрометрія ГХ-МС, РХ-МС, ВЕРХ-МС). Методи іонізації і десорбції речовини за атмосферним тиском.

Розділ 3. Застосування мас-спектрометрії у біофізичних дослідженнях.

1. Будова білків: амінокислоти, пептиди, білки. Рівні структурної організації білків (первинна, вторинна, третинна структури). Проблема переводу білків до газової фази і запропоновані способи її подолання.
2. Основні фізико-хімічні властивості амінокислот і білків: полярність, гідрофільність/гідрофобність, зарядовий стан (катиони, аніони, цвіттер-іони), термічна стабільність та денатурація. Їх роль, використання та визначення в мас-спектрометричних експериментах.
3. Роль мас-спектрометрії у формуванні наукового напрямку “протеоміка”. Можливості мас-спектрометрії у протеомних дослідженнях.
4. Методики активації/дисоціації іонів зіткненням. Фрагментація поліпептидного ланцюга, класифікація (номенклатура) фрагментів.
5. Пептидний зв'язок, пептиди, поліпептиди. Мас-спектрометричне визначення первинної структури білків і пептидів, секвенування. Два підходи до визначення структури білків: “знизу вгору” (bottom-up) і “зверху вниз” (top-down).
6. Мас-спектрометричні підходи до визначення конформації білків у газовій фазі. Прийом дейтерообміну. Мас-спектрометрія іонної рухливості (ion mobility mass spectrometry).
7. Мас-спектрометричний іміджінг (візуалізація) неорганічних і органічних зразків. Техніка експерименту. Галузі практичного застосування.
8. Мас-спектрометрія з іонізацією на повітрі (ambient ionization methods), її використання у мас-спектрометрії іміджінгу.
9. Біомедичне застосування мас-спектрометрії іміджінгу. Використання у криміналістиці та у космічних дослідженнях.
10. Мас-спектрометрія нуклеїнових кислот: вирішення біофізичних задач. Термодинаміка міжмолекулярних взаємодій компонентів нуклеїнових кислот.
11. Структура нуклеїнових кислот ДНК і РНК. Нуклеїнові кислоти у газовій фазі. Плавлення ДНК і його симуляція у мас-спектрометричних експериментах.
12. Низькотемпературна мас-спектрометрія, її розвиток у ФГІНТ НАН України. Застосування у дослідженнях невалентних кластерів води та неорганічних сполук.
13. Низькотемпературна мас-спектрометрія і можливості її застосування для вирішення кріобіофізичних задач.
14. Застосування мас-спектрометрії у фармакологічних дослідженнях (аналіз фармакологічних препаратів, механізми дії біологічно активних речовин).

