

SYLLABUS

I. Informații generale despre curs, seminar și lucrări de laborator

Titlul disciplinei	Metode de rezonanță cu aplicații biomedicale (DA)
Codul	
Nr. credite	6
Nr. ore săptămânal	2 curs + 2 laborator
Locul de desfășurare	conform orarului
Programarea în orar	conform orarului
An/semestru	I/II

II. Informații despre titularul de curs

Nume	Flaviu Turcu, Cora Crăciun
Gradul didactic	Conferențiar
Titlul științific	doctor
E-mail	fturcu@phys.ubbcluj.ro , cora.craciun@phys.ubbcluj.ro
Telefon	0264 405300 int. 5167
Ore de audiență	4 ore pe săptămână: Marti și Joi de la 12:00 la 14:00

III. Descrierea disciplinei

OBIECTIVELE CURSULUI: Cursul introduce noțiuni fundamentale și aplicative din rezonanța magnetică nucleară și respectiv electronică de spin; temele tratate sunt legate de spinul nuclear, moment magnetic și magnetizare (longitudinală și transversală), procese de relaxare (spin – spin și spin – rețea), deplasarea chimică (izotropă, anizotropă) interacțiunea directă și indirectă, interacțiunea cuadrupolară, spinul electronic, interacțiunea Zeeman, cuplajul spin-orbită, factorul g, interacțiunea hiperfină; spectroscopia RMN ¹H, ¹³C, ¹⁵N, spectroscopia 2D homo- și hetero-nucleară, interacțiunea spinului electronic cu spinul nuclear, secvențe de puls de Radio Frecvență (RF), experimente la temperatură variabilă, spectroscopia RPE a compusilor biologici aflați în stare solidă sau de geluri, procesarea spectrelor RMN și RPE, simularea spectrelor RMN și RPE; Cursul urmărește să ofere studenților bazele teoretice și practice necesare înțelegerii și totodată învățarea unor metode și protocoale utilizate în rezonanța magnetică, înțelegerea modelelor care descriu aplicarea acestor cunoștințe în diferite probleme biomedicale. Se urmărește familiarizarea studenților cu principalele metode de investigare RMN și RPE și formarea deprinderilor pentru analize și prelucrări de spectre și date.

ABILITĂȚI DOBÂNDITE:

Abilități teoretice: înțelegerea fenomenologiei asociate cu rezonanța magnetică nucleară; achiziția de spectre și date, analizarea teoretică și practică a metodelor de rezonanță.

Abilități și deprinderi practice: formarea deprinderilor pentru achiziția, analiza și prelucrarea datelor și interpretarea datelor obținute prin spectroscopia RMN și respectiv RPE.

IV. Bibliografie obligatorie

1. A. Abragam, B. Bleaney, *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*, Clarendon Press, Oxford (1970)
2. N.M. Atherton, *Principles of Electron Spin Resonance*, Ellis Harwood, New York, (1993)
3. R.R. Ernst, *Magnetische Resonanz*, ETH Zurich.
4. G. Jeschke, A. Schweiger, *Principle of Pulse Electron Paramagnetic Resonance*, Oxford University Press (2001)
5. ER Series Users's Manual, Bruker Analytische Messtechnik GmbH, Karlsruhe (1983)
6. Yu.N. Molin, K.M. Salikhov, K.I. Zamaraev, *Spin Exchange: Principles and Applications in Chemistry and Biology*, Springer-Verlag, New York, (1980)
7. Encyclopedia of Nuclear Magnetic Resonance, Eds. David Grant and Robert Harris, John Wiley & Sons Ltd. Chichester, 2002
8. C.P. Slichter, *The Principles of Nuclear Magnetic Resonance*, Springer, New York, 2000

9. R.R. Ernst, G. Bodenhausen, A. Wokaun, *Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions*, Clarendon Press, Oxford, 1987
10. J.P. Hornak, *Basic of NMR*, <http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/>

V. Materiale folosite în cadrul procesului educațional specific disciplinei:

- a) la curs: calculator pentru prelegerea combinată (Power Point, folii, tablă).
- b) la laborator: scanner IRMN, calculator

VI. Planificarea/Calendarul întâlnirilor și a verificărilor/examinărilor intermediare

VI.a CURS

Nr. temă	Tema	Conținut	Nr. ore	Bibliografie
1	Principiile de baza ale rezonanței paramagnetice electronice	Notiuni fundamentale despre spinul electronic, câmpul magnetic, momentul magnetic; Interacțiunea Zeeman.	2	1, 2, 3
2	Principiile de baza ale rezonanței paramagnetice electronice	Despicarea de câmp cristalin; Cuplaj spin-orbita; Factorul g și interacțiunea hiperfina; Despicare în câmp-zero; Interacțiunea cuadrupolara;	2	1, 2, 3, 8
3	Apecte practice ale spectroscopiei RPE	Timpii de relaxare și largimea liniilor; Iradierea în undă continuă versus iradierea în pulsuri; Magnetizarea macroscopică și sistemul rotativ de coordonate;	2	1,2,3,5, 8
4	Aplicații RPE în bio investigații medicale	Antioxidanți; fotosinteza; reacții enzimatic; structura site-urilor active din metaloproteine; generarea fotochimică a radicalilor; NO în sistemele biologice	2	3, 4
5	Principiile de baza ale rezonanței magnetice nucleare	Notiuni fundamentale; Tratarea clasică; Modelul cuantic; RMN în impulsuri/ transformarea Fourier	2	1, 2, 8
6	Principiile de baza ale rezonanței magnetice nucleare	Momentul magnetic; Magnetizarea; Nivelele energetice;	2	1, 8
7	Interacțiuni nucleare I	Interacțiunea de ecranare chimică; Interacțiunea directă; Interacțiunea indirectă;	2	1, 8
8	Interacțiuni nucleare II	Interacțiunea cuadrupolara; Interacțiunea cu câmpul de Radio Frecvență	2	1, 8
9	Sisteme de referință	S.R. al laboratorului; S.R. al axelor principale; S.R. rotativ;	2	3, 7
10	Aplicații de baza ale RMN în biomedicină	Analiză probelor aflate în stare lichidă și respectiv solidă; avantaje/dezavantaje; Rotarea ultra rapidă influențe asupra separației spectrale.	2	7, 8, 9
11	Analize structurale – ^1H & ^{13}C	1D – SP; SPHPD; CP; Spectroscopie de corelație homo- și hetero-nucleară 2D COSY; NOESY;	2	7, 9
12	Analize structurale nucleare –	1D & 2D: ^{23}Na , ^{43}Ca , $^{39\&41}\text{K}$, ^{25}Mg ; Tehnica echourilor;	2	7, 9

	cuadрупolare			
13	Determinarea structurii proteinelor.	Determinarea cuplajelor slabe J ; Tehnici de determinarea a distanțelor internucleare: REDOR, TEDOR, REAPDOR, TRAPDOR	2	7, 9
14	Determinarea dinamicii moleculare	Difuzivitatea; viscozitatea; T_1 , T_2 și T_2^*	2	10

VI.b SEMINARII

Nr. temă	Conținut	Nr. ore	Bibliografie
1	Măsuri de siguranță și protecție. Câmpul magnetic static al spectrometrului RPE și RMN	2	
2	Setarea spectrometrului RPE pentru analiza probelor solide și lichide la temperatura camerei	2	
3	Analiza radicalilor generați prin procese fotochimice	2	
4	Analiza radicalilor liberi în fluide și țesuturi vi	2	
5	Procesarea și simularea spectrelor RPE	2	
6	Setarea spectrometrului RMN pentru analiza probelor lichide și solide	2	
7	Pregătirea probelor solide și lichide pentru analiza RMN	2	
8	Analize RMN: Setarea parametrilor critici: putere, lungime puls, timp de relaxare, etc	2	
9	Analize 1D: experimente cu puls simplu, transfer de polarizare, decuplare.	2	
10	Determinarea timpilor de relaxare T_1 , T_2 și T_2^*	2	
11	Analiza 2D homo-nucleară: COSY, HMQC, MQMAS, STMAS	2	
12	Analiza 2D hetero-nucleară: INEPT, REDOR, SEDOR	2	
13	Procesarea spectrelor RMN 1D și 2D	2	
14	Simularea spectrelor RMN și obținerea parametrilor de caracterizare structurală	2	

VII. Modul de evaluare

Pentru stabilirea calificativului final vor fi parcurse **două etape**:

- O etapă **eliminatoire** constând dintr-un chestionar cu 20 de întrebări. Răspunsurile la întrebări presupun cunoștințe minimale de rezonanță magnetică. Numărul minim de răspunsuri corecte este 18. Chestionarul se completează în ziua în care se desfășoară examinarea orală.
- Examinarea **orală**. Fiecare bilet de examen va conține două subiecte teoretice și o problemă.

Calificativul final va avea următoarea structură: **10%** oficiu + **50%** examen oral + **15%** evaluarea continuă activitate laborator + **25%** proiect individual

VIII. Detalii organizatorice, gestionarea situațiilor excepționale

Prezența la cursuri este opțională. Efectuarea lucrărilor de laborator este obligatorie în proporție de 80%. Aceste procente condiționează posibilitatea de prezentare la probele de evaluare finală.

Recuperarea lucrărilor de laborator se va putea face cu respectarea hotărârilor Consiliului Profesoral al facultății.

Eventualele situații de fraudă la examen vor fi sancționate conform prevederilor Regulamentului de Credite Transferabile al universității și hotărârilor Consiliului Profesoral al facultății.

Semnătura titularului de curs

Conf. Dr. Flaviu Turcu
Conf.dr. Cora Crăciun

Semnătura titularului de seminar

Conf. Dr. Flaviu Turcu
Conf.dr. Cora Crăciun

Semnătura titularului de laborator

Conf. Dr. Flaviu Turcu
Conf.dr. Cora Crăciun

Data completării

25.04.2018

Data avizării în departament

27.04.2018

Semnătura directorului de departament

Prof. Dr. V. Chiș