

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(государственный университет)»**



**«УТВЕРЖДАЮ**

**Проректор по учебной работе  
и экономическому развитию**

\_\_\_\_\_ **Д.А. Зубцов**

**Рабочая программа дисциплины (модуля)**

**по дисциплине:** Современная масс-спектрометрия  
**по направлению:** Прикладные математика и физика (бакалавриат)  
**профиль подготовки:** Химическая физика и свойства наноструктур  
Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра химической физики  
**курс:** 4  
**квалификация:** бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8(Весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

практические и семинарские занятия: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 12 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 72, всего зач. ед.: 2

**Программу составил:** М.В. Горшков, канд. физ.-мат. наук

**Программа обсуждена на заседании кафедры**

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий кафедрой

А.А. Берлин

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

Декан факультета

В.М. Некипелов

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

Целью курса является изучение существующих масс-спектрометрических методов идентификации сложных органических и биоорганических соединений, включая белки и пеп-тиды.

### Задачи дисциплины

- освоение студентами физических основ существующих типов масс-анализаторов;
- приобретение базовых знаний о современных подходах на основе масс-спектрометрии к идентификации структуры биоорганических соединений и их количественному анализу;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных теоретических и экспериментальных исследований в области масс-спектрометрии;

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Данная дисциплина относится к вариативной части образовательной программы.

Дисциплина «Современная масс-спектрометрия» базируется на дисциплинах:

Общая и неорганическая химия;  
Физические методы исследований;  
Физические методы исследований: лабораторный практикум;  
Введение в математический анализ;  
Вычислительная математика;  
Дифференциальные уравнения;  
Линейная алгебра;  
Основы химической физики;  
Теория вероятностей;  
Теория функций комплексного переменного;  
Уравнения математической физики;  
Общая физика: лабораторный практикум;  
Общая физика: термодинамика и молекулярная физика;  
Общая физика: оптика;  
Аналитическая геометрия;  
Основы химической физики: лабораторный практикум;  
Кратные интегралы и теория поля;  
Общая физика: механика;  
Общая физика: электричество и магнетизм;  
Многомерный анализ, интегралы и ряды;  
Гармонический анализ;  
Общая физика: квантовая физика.

Дисциплина «Современная масс-спектрометрия» предшествует изучению дисциплин:

Научно-исследовательская работа.

## 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

## В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

### знать:

- основные представления теории движения ионов в электромагнитных полях;
- основные представления о типах масс-анализаторов и принципах их работы;
- порядки численных величин, характерные для молекулярной физики;

### уметь:

- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных молекулярных процессов;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

### владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами биомacro-молекул, электромагнитного излучения и взаимодействия между ними;

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

### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу				
		Лекции	Практические и семинарские занятия	Лаборат. работы	Задания, курсовые работы	Самост. работа
1	Основы масс-спектрометрического анализа веществ	1				
2	Ионизация атомов и молекул в газовой фазе	1				4
3	Источники ионизации при атмосферном давлении и принципы их работы	2				
4	Методы ионизации при исследовании биомacroмолекул	2				1
5	Масс-анализаторы: основные принципы работы и характеристики	1				
6	Времяпролетный масс-анализатор	2				
7	Масс-анализатор ионного циклотронного резонанса с преобразованием Фурье	3				1

8	Электродинамическая орбитальная ионная ловушка Орбитрэп с преобразованием Фурье	3				1
9	Радиочастотная квадрупольная ионная ловушка Паули	3				1
10	Линейные радиочастотные мультипольные системы	2				1
11	Тандемная масс-спектрометрия макромолекул	2				1
12	Методы фрагментации макромолекул и их реализация в современных масс-спектрометрических системах	2				1
13	Гибридные масс-спектрометры	2				
14	Комбинация масс-спектрометра с системами предварительного разделения смесей веществ	2				1
15	Обзор масс-спектрометрических систем, используемых для идентификации и анализа белков в задачах протеомики	2				
Итого часов		30				12
Подготовка к экзамену		30 час.				
Общая трудоёмкость		72 час., 2 зач.ед.				

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 8 (Весенний)

##### 1. Основы масс-спектрометрического анализа веществ

Основные составляющие масс-спектрометра. Вакуумная система. Способы получения высокого вакуума. Масс-спектр. Уравнение калибровки масс-спектрометра.

##### 2. Ионизация атомов и молекул в газовой фазе

Потенциал ионизации. Электронный удар. Химическая ионизация. Фотоионизация. Бомбардировка быстрыми атомами. Эффективность образования ионов в источниках ионизации.

##### 3. Источники ионизации при атмосферном давлении и принципы их работы

Химическая ионизация при атмосферном давлении. Лазерная десорбция/ионизация. Электроспрей и способы его реализации. Механизм образования ионов в источнике электроспрей. Десорбционная электроспрейная ионизация. Пеннинговская ионизация и ее реализация в источниках ДАРТ.

##### 4. Методы ионизации при исследовании биомacroмолекул

Масс-спектры биомакромолекул при ионизации в источнике электроспрей. Алгоритм Фена. Физико-химические факторы, влияющие на эффективность образования ионов в источнике электроспрей. Механизм образования ионов в источниках МАЛДИ. Практическая реализация лазерной десорбции/ионизации в матрице. Физико-химические факторы, влияющие на эффективность ионизации в источниках МАЛДИ

#### 5. Масс-анализаторы: основные принципы работы и характеристики

Детекторы ионов: цилиндр Фарадея, вторичный электронный умножитель, многоканальный усилитель. Движение ионов в электрических и магнитных полях. Разрешающая способность. Динамический диапазон детектирования. Чувствительность и порог детектирования масс-анализатора. Диапазон измеряемых масс.

#### 6. Времяпролетный масс-анализатор

Основное уравнение времяпролетной масс-спектрометрии. Уравнение калибровки. Рефлектрон.

#### 7. Масс-анализатор ионного циклотронного резонанса с преобразованием Фурье

Уравнение движение ионов в скрещенных электрическом и магнитном полях. Пеннинговская ионная ловушка. Динамика движения ионов в Пеннинговской ловушки и фундаментальные моды колебаний ионов. Магнетронное уширение ионного облака. Преобразование Фурье. Ион-ионные взаимодействия и их влияние на точность измерения масс ионов. Явление коалесценции ионных облаков. Дипольное, квадрупольное и поляризованные возбуждения циклотронного движения ионов.

#### 8. Электродинамическая орбитальная ионная ловушка Орбитрэп с преобразованием Фурье

Ионная ловушка Киндона. Идеальная электростатическая ионная ловушка Найта. Основные моды колебаний ионов в орбитальной ловушке. Принцип электродинамического сжатия ионных облаков. Уравнение калибровки. Влияние ион-ионных взаимодействий на точность измерения масс.

#### 9. Радиочастотная квадрупольная ионная ловушка Паули

Уравнение движения ионов в радиочастотной квадрупольной ионной ловушке. Понятие эффективного потенциала. Основные моды колебаний ионов в ловушке Паули. Диаграмма стабильности. Влияние ион-ионных взаимодействий на диаграмму стабильности. Способы измерения масс в ловушке Паули. Уравнение калибровки. Радиочастотная квадрупольная ионная ловушка с преобразованием Фурье.

#### 10. Линейные радиочастотные мультипольные системы

Масс-фильтр на основе радиочастотного квадрупольного поля. Принципы фильтрации и изолирование ионов по массам. Распределение электрических полей в радиочастотных мультиполях. Удерживание и транспорт ионов от источника ионизации до масс-анализатора на основе радиочастотных мультиполей. Линейная квадрупольная радиочастотная ионная ловушка ЛИТ. Влияние ион-ионных взаимодействий на точность измерения масс и разрешающую способность в ЛИТ.

#### 11. Тандемная масс-спектрометрия макромолекул

Идентификация структуры веществ на основе масс-спектров фрагментации. Идентификация белков и пептидов с использованием геномных баз данных. Протеомные поисковые машины. Вероятностные подходы к проверке достоверности идентификаций белков.

12. Методы фрагментации макромолекул и их реализация в современных масс-спектрометрических системах

Номенклатура ионов фрагментов полипептидов. Столкновительная фрагментация. Реализация столкновительной фрагментации в радиочастотных мультипольных системах. Метод внерезонансного возбуждения циклотронного движения ионов в Пеннинговских ловушках и фрагментация ионов макромолекул на его основе. Диссоциативный захват медленных электронов. Диссоциативная передача электрона в ион-ионных взаимодействиях. Диссоциативное взаимодействие ионов макромолекул с инфракрасным излучением. Активация и фрагментация ионов макромолекул в области источника ионизации. Диссоциативное взаимодействие ионов макромолекул с поверхностью.

13. Гибридные масс-спектрометры

Гибридизация масс-анализатора первого и второго уровней. Многоступенчатые вакуумные системы. Времяпролетные масс-спектрометры с ортогональным вводом ионов. Комбинация линейных радиочастотных мультипольных ионных ловушек и масс-анализаторов высокого разрешения.

14. Комбинация масс-спектрометра с системами предварительного разделения смесей веществ

Основные принципы жидкостно-хроматографического разделения макромолекул. Жидкостная хроматография на основе гидрофобных и гидрофильных взаимодействий. Ортогональное пространство поиска и идентификации биомacroмолекул (время, масса).

15. Обзор масс-спектрометрических систем, используемых для идентификации и анализа белков в задачах протеомики

Основные требования к масс-спектрометрам, используемым в протеомных исследованиях. Квадрупольные радиочастотные масс-спектрометры для экспресс анализа. Гибридные хромато-масс-спектрометрические системы высокого разрешения.

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

Учебная аудитория, макет гибридного масс-спектрометра ионного циклотронного резонанса в лаборатории М.В. Горшкова ИНЭП ХФ РАН

## **6. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Основная литература

1. Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского.-5-е из-д., стереотип.-М.:Физматлит.Т. 3:Квантовая механика. Нерелятивистская теория.-2004.-808 с.
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л.П. Питаевского.-5-е изд., стереотип.-М.:Физматлит.Т. 1:Механика.- 2007.-224 с.
3. R.E. March, Quadrupole ion trap mass spectrometry. M: John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, 2000
4. T. Liu, M.E. Belov, N. Jaitly, W.-J. Qian, R.D. Smith, Accurate Mass Measurements in Proteomics, Chemistry Reviews, 107, 3621-3653 (2007).
5. Z. Ning, H. Zhou, F. Wang, M. Abu-Farha, D. Figeys, Analytical Aspects of Proteomics: 2009-2010, Analytical Chemistry, 83, 4407-4426 (2011)
6. M. Scigelova, M. Hornshaw, A. Giannokopolus, A. Makarov, Fourier transform mass spectrometry, MCP O111.009431, 2011.
7. M.A. Baldwin, Peptide identification by mass spectrometry, MCP 3.1, (<http://www.mcponline.org>), 2004.
8. R.D. Smith, Evolution of ESI mass spectrometry and Fourier transform ion cyclotron resonance for proteomics and other biological applications, International Journal of Mass Spectrometry, 200, 509-544 (2000).

#### Дополнительная литература

9. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997, 558 с. ( <http://www.chemport.ru/?cid=33&p=1> ) Гл. 1-6.
10. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1. М.: Мир, 1974, 422 с. (<http://nehudlit.ru/1/1249/> ) Гл. 1-3.
11. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1. М.: Мир, 1974, 422 с. (<http://nehudlit.ru/1/1249/> ) Гл. 4.
12. А.Т.Лебедев. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003.
13. Керрингтон Н., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.
14. Сысоев Ф.Ф., Чупахин М.С. Введение в масс-спектрометрию. М., Атомиздат, 1977.
15. Бернард Дж. Современная масс-спектроскопия. М.: ИЛ, 1957.
16. P. H. Dawson, Quadrupole mass spectrometry and its applications. M: American Vacuum Society Classics, American Institute of Physics, Woodbury, 1976.
17. R.B. Cole, Electrospray ionization mass spectrometry: Fundamentals, instrumentation, and applications. M: John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, 1997.
18. L.S. Brown, G. Gabrielse, Geonium theory: Physics of a single electron or ion in a Penning trap, Review of Modern Physics, 58, 233-311 (1986).

## 7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

#### Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена в 8-ом семестре

- 1) Основные конструктивные элементы масс-спектрометра. Методы получения высокого вакуума. Типы вакуумных насосов и принципы их работы. Разрешающая способность масс-спектрометра. Понятие чувствительности и предела детектирования. Динамический диапа-зон детектирования. Точность измерения масс.
- 2) Уравнение движения ионов в электрических и магнитных полях. Приближение одномерного гармонического осциллятора для описания динамики движения ионов в Пеннинговских ловушках. Преобразование Лиувилля.
- 3) Ионная ловушка Паули. Уравнение Матье для описания динамики движения ионов в пере-менном электрическом поле. Диаграмма стабильности и ее основные характеристики в при-менении к радиочастотной квадрупольной масс-спектрометрии. Параметр стабильности. Влияние кулоновских взаимодействий между ионами на форму диаграммы стабильности в ловушках Паули.
- 4) Гармонический осциллятор в быстроосциллирующем внешнем поле. Понятие эффективного потенциала. Связь эффективного потенциала с экспериментальными параметрами. Линейная радиочастотная квадрупольная
- 5) Точное решение уравнения движения ионов в ловушке Пеннинга в приближении однород-ного магнитного и квадрупольного электростатического полей. Собственные частоты коле-баний ионов в ловушках Пеннинга и их связь с экспериментальными параметрами. Дрейфовые движения ионов в скрещенных электрическом и магнитном полях. Магнетронное уширение. Понятие коалесценции ионных облаков в ловушке Пеннинга.
- 6) Масс-спектрометрия с преобразованием Фурье. Форма спектральных линий и ее связь с экс-периментальными параметрами. Механизмы уширения спектральных линий. Однородное и неоднородное уширение. Лоренцевая форма масс-спектральных линий.
- 7) Электростатические ионные ловушки. Идеальная ловушка Киндона. Уравнение Найта для идеальной ловушки Киндона. Электродинамическая орбитальная ловушка Орбитрэп. Соб-ственные частоты колебаний ионов в ловушке Орбитрэп и их связь с экспериментальными параметрами. Электродинамическое сжатие ионных облаков.
- 8) Уравнение калибровки шкалы масс. Методы калибровки масс-анализаторов разного типа. Точность измерения масс. Понятие разрешающей способности масс-спектрометра. Изотопи-ческая структура масс-спектров ионов биомакромолекул. Тонкая изотопическая структура.
- 9) Механизм образования ионов в источнике электроспрей. Эффективность ионизации в ис-точниках электроспрей. Масс-спектры многозарядных ионов. Алгоритм Фенна. Конструк-тивные особенности источника электроспрей.
- 10) Источник лазерной десорбции/ионизации в матрице (МАЛДИ) и его практическая реализа-ция. Механизм образования ионов в источнике МАЛДИ. Влияние физико-химических свойств матрицы и подложки на эффективность образования ионов.
- 11) Тандемная масс-спектрометрия. Методы фрагментации макромолекул. Аминокислотная по-следовательность белков и пептидов. Пептидная связь. Основные серии ионов фрагментов пептидов. Зависимость масс-спектров диссоциации пептидов от метода фрагментации.
- 12) Геномные базы данных белков. Основные методы масс-спектрометрической иденти-фикации белков живых организмов. Метод пептидных отпечатков масс. Протеомная поисковая машина. Масс-спектрометрическое секвенирование de novo. Вероятностные подходы к проверке достоверности масс-спектрометрических идентификаций белков и пептидов.



13) Роль жидкостной хроматографии в протеомных исследованиях. Интерфейс жидкостной хроматограф/масс-спектрометр. Понятие ортогональности экспериментальных данных. Идентификация белков и пептидов в двухмерном пространстве хроматографического времени удерживания и массы. Масс-спектрометр с разделением по ионной подвижности.

14) Масс-спектрометрические подходы к поиску белковых биомаркеров ранней стадии заболеваний. Методы количественного анализа белков в клеточных экстрактах. Масс-спектрометр на основе тройного радиочастотного квадруполья. Метод количественного анализа пептидов на основе множественного мониторинга диссоциативных переходов.

15) Основные принципы построения гибридных масс-спектрометрических систем. Гибридизация первого и второго уровня. Гибридные масс-спектрометрические системы с обратной связью по количеству анализируемых ионов.

## **8. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения**

Приложение

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ  
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

**по направлению:** Прикладные математика и физика (бакалавриат)  
**профиль подготовки:** Химическая физика и свойства наноструктур  
Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра химической физики  
**курс:** 4  
**квалификация:** бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8(Весенний) - Экзамен

**Разработчик:** М.В. Горшков, канд. физ.-мат. наук

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Современная масс-спектрометрия» обучающийся должен:

### знать:

- основные представления теории движения ионов в электромагнитных полях;
- основные представления о типах масс-анализаторов и принципах их работы;
- порядки численных величин, характерные для молекулярной физики;

### уметь:

- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных молекулярных процессов;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

### владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами биомacro-молекул, электромагнитного излучения и взаимодействия между ними;

## 3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена в 8-ом семестре

- 1) Основные конструктивные элементы масс-спектрометра. Методы получения высокого вакуума. Типы вакуумных насосов и принципы их работы. Разрешающая способность масс-спектрометра. Понятие чувствительности и предела детектирования. Динамический диапазон детектирования. Точность измерения масс.
- 2) Уравнение движения ионов в электрических и магнитных полях. Приближение одномерного гармонического осциллятора для описания динамики движения ионов в Пеннинговских ловушках. Преобразование Лиувилля.
- 3) Ионная ловушка Паули. Уравнение Матье для описания динамики движения ионов в переменном электрическом поле. Диаграмма стабильности и ее основные характеристики в применении к радиочастотной квадрупольной масс-спектрометрии. Параметр стабильности. Влияние кулоновских взаимодействий между ионами на форму диаграммы стабильности в ловушках Паули.
- 4) Гармонический осциллятор в быстроосциллирующем внешнем поле. Понятие эффективного потенциала. Связь эффективного потенциала с экспериментальными параметрами. Линейная радиочастотная квадрупольная

- 5) Точное решение уравнения движения ионов в ловушке Пеннинга в приближении однородного магнитного и квадрупольного электростатического полей. Собственные частоты колебаний ионов в ловушках Пеннинга и их связь с экспериментальными параметрами. Дрейфовые движения ионов в скрещенных электрическом и магнитном полях. Магнетронное уширение. Понятие коалесценции ионных облаков в ловушке Пеннинга.
- 6) Масс-спектрометрия с преобразованием Фурье. Форма спектральных линий и ее связь с экспериментальными параметрами. Механизмы уширения спектральных линий. Однородное и неоднородное уширение. Лоренцевая форма масс-спектральных линий.
- 7) Электростатические ионные ловушки. Идеальная ловушка Киндона. Уравнение Найта для идеальной ловушки Киндона. Электродинамическая орбитальная ловушка Орбитрэп. Собственные частоты колебаний ионов в ловушке Орбитрэп и их связь с экспериментальными параметрами. Электродинамическое сжатие ионных облаков.
- 8) Уравнение калибровки шкалы масс. Методы калибровки масс-анализаторов разного типа. Точность измерения масс. Понятие разрешающей способности масс-спектрометра. Изотопическая структура масс-спектров ионов биомолекул. Тонкая изотопическая структура.
- 9) Механизм образования ионов в источнике электроспрей. Эффективность ионизации в источниках электроспрей. Масс-спектры многозарядных ионов. Алгоритм Фенна. Конструктивные особенности источника электроспрей.
- 10) Источник лазерной десорбции/ионизации в матрице (МАЛДИ) и его практическая реализация. Механизм образования ионов в источнике МАЛДИ. Влияние физико-химических свойств матрицы и подложки на эффективность образования ионов.
- 11) Тандемная масс-спектрометрия. Методы фрагментации макромолекул. Аминокислотная последовательность белков и пептидов. Пептидная связь. Основные серии ионов фрагментов пептидов. Зависимость масс-спектров диссоциации пептидов от метода фрагментации.
- 12) Геномные базы данных белков. Основные методы масс-спектрометрической идентификации белков живых организмов. Метод пептидных отпечатков масс. Протеомная поисковая машина. Масс-спектрометрическое секвенирование de novo. Вероятностные подходы к проверке достоверности масс-спектрометрических идентификаций белков и пептидов.
- 13) Роль жидкостной хроматографии в протеомных исследованиях. Интерфейс жидкостной хроматограф/масс-спектрометр. Понятие ортогональности экспериментальных данных. Идентификация белков и пептидов в двумерном пространстве хроматографического времени удерживания и массы. Масс-спектрометр с разделением по ионной подвижности.
- 14) Масс-спектрометрические подходы к поиску белковых биомаркеров ранней стадии заболеваний. Методы количественного анализа белков в клеточных экстрактах. Масс-спектрометр на основе тройного радиочастотного квадруполья. Метод количественного анализа пептидов на основе множественного мониторинга диссоциативных переходов.
- 15) Основные принципы построения гибридных масс-спектрометрических систем. Гибридизация первого и второго уровня. Гибридные масс-спектрометрические системы с обратной связью по количеству анализируемых ионов.

#### 4. Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

## **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрс обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.