

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ

Директор института

проф. Д.Х.Н. Федотов О.В.

О.В.
"21" *мая* 2019 г.

Рабочая программа дисциплины
Масс-спектрометрия и хроматомасс-спектрометрия

Направление подготовки бакалавриата
04.03.01 Химия

Профиль подготовки бакалавриата
Аналитическая химия и химическая экспертиза

Квалификация (степень)
Бакалавр

Форма обучения
очная

Саратов
2019

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Горячева Ирина Юрьевна	<i>Тер</i>	21.05.2019
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна	<i>Крылат</i>	21.05.2019
Заведующий кафедрой	Черкасов Дмитрий Геннадиевич	<i>Черк</i>	21.05.2019
Специалист Учебного управления	Зими́на Елена Валерьевна	<i>Земик</i>	21.05.2019г.

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия» являются:

- 1) формирование у будущего специалиста:
 - понимания дисциплины «Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия»;
 - знаний о масс-спектрометрическом распаде вещества, использовании его для идентификации и количественного анализа;
 - навыков межличностных отношений и способности работать в научном коллективе;
 - умения принимать нестандартные решения при разработке стратегий определения целевых веществ в различных объектах;
- 2) ознакомление с современными тенденциями и подходами в масс-спектрометрическом определении.
- 3) Формирование готовности к выполнению профессиональных задач на основе умения применять оптимальные подходы и экспериментальные решения, планировать, организовывать свою деятельность, самостоятельно приобретать знания, используя различные источники информации.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия» (Б1.В.ДВ.04.01) относится к дисциплинам по выбору части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 — Дисциплины (модули) рабочего учебного плана ООП по направлению подготовки 04.03.01 — Химия, профилю «Аналитическая химия». Данная дисциплина изучается в 8 семестре.

Материал дисциплины базируется на знаниях по общей, неорганической, органической, аналитической химии, химии высокомолекулярных соединений, химической технологии (теория растворов, метод молекулярных орбиталей, строение органических молекул, методы анализа, свойства полимеров, технология получения полимеров), методам математической статистики в объеме курсов ООП по направлению «Химия» и является основой для последующего успешного прохождения практики и выполнения выпускной квалификационной работы.

3. Результаты обучения по дисциплине

Код и наименование	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
--------------------	--	---------------------

компетенции		
<p>ПК-1. Владеет системой фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>ПК-1.1. Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования.</p> <p>ПК-1.2. Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности</p> <p>ПК-1.3. Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин</p>	<p>Знать</p> <ul style="list-style-type: none"> • физико-химические основы масс-спектрометрического определения и идентификации, пути улучшения параметров разделения и детектирования, преимущества, недостатки метода и возможность применения масс-спектрометрии для решения различных практических задач; • основы и принципы масс-спектрометрического распада, принципы повышения чувствительности и качественной идентификации, основы масс-спектрометрического распада. • нормы техники безопасности при работе с лабораторным оборудованием. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> • обсуждать результаты проведенного исследования, ориентироваться в современной литературе по применению масс-спектрометрии в различных областях науки и производства, вести дискуссию по вопросам закономерностей и использования масс-спектрометрии. • Проводить поиск научной и научно-технической информации, обработку данных, пользоваться библиотеками масс-спектров. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> • навыками работы на современном масс-спектрометрическом оборудовании; способен применять информационные и компьютерные технологии при проведении анализа реальных объектов, эксплуатации оборудования и обработке полученных результатов.
<p>ПК-5. Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения под руководством специалистов более высокой квалификации</p>	<p>ПК-5.1. Выбирает методы и средства контроля качества, сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения на соответствие требуемой нормативной документации</p> <p>ПК-5.2. Выполняет стандартные операции на типовом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства.</p> <p>ПК-5.3. Составляет протоколы испытаний, отчеты о выполненной работе по заданной форме</p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> • основные методы и способы контроля качества сырья и компонентов; • основные способы и приемы работы с масс-спектрометрическим и хроматографическим оборудованием; <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> • самостоятельно разрабатывать методики определения компонентов в различных объектах; выбирать условия разделения целевых продуктов (неподвижную и подвижную фазы, вариант детектирования); • выполнять стандартные операции с использованием хроматографического и масс-спектрометрического оборудования. • составлять протоколы испытаний и отчеты о выполненной работе. <p>Владеть:</p>

		<ul style="list-style-type: none"> • теорией и навыками практической работы; • навыками лабораторного использования оборудования, пробоподготовки образцов.
--	--	---

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Лекции	Лабораторные	СР	Контроль	Всего	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Формы промежуточной аттестации (по семестрам)
1	Введение. Устройство масс-спектрометра. Масс-спектры.	8	1-3	4	6	2		12	Семинар.
2	Источники получения ионов (электронный удар, химическая ионизация, электрораспылительная ионизация, искровая масс-спектрометрия, лазерная масс-спектрометрия, масс-спектрометрия вторичных ионов)	8	4,5	2	6	4		12	Семинар, Письменный отчет в лабораторном журнале.
3	Типы масс-анализаторов. Квадрупольные, ионные ловушки, времяпролетные	8	8-12	4	12	4		20	Устный отчет
4	Тандемная масс-спектрометрия	8	6,7	2	8	4		14	Устный отчет
5	ГХ-МС, ЖХ-МС	8	13-17	2	8	4		14	Деловая игра. Письменный отчет в лабораторном журнале Реферат
	Промежуточная аттестация.	8					36	36	Экзамен

	Итого: часов			14	40	18	36	108	
--	--------------	--	--	----	----	----	----	-----	--

Содержание дисциплины «Масс-спектрометрия и хроматомасс-спектрометрия»

Введение. Устройство масс-спектрометра. Масс-спектры

Основные понятия и определения

Сущность масс-спектрометрии. История возникновения.

Современное состояние метода и области применения, значение и место среди других методов исследования.

Масс-спектрометрические детекторы.

Принцип метода масс-спектрометрии.

Источники получения ионов (электронный удар, химическая ионизация, электрораспылительная ионизация, искровая масс-спектрометрия, лазерная масс-спектрометрия, масс-спектрометрия вторичных ионов)

Классификация методов по типам источников получения ионов (электронный удар, химическая ионизация, электрораспылительная ионизация, искровая масс-спектрометрия, масс-спектрометрия тлеющего разряда, лазерная масс-спектрометрия, масс-спектрометрия вторичных ионов).

Типы масс-анализаторов. Квадрупольные, ионные ловушки, времяпролетные

Типы масс-анализаторов (статические, динамические, времяпролетные) и основные принципы их работы.

Масс-спектрометрия низкого и высокого разрешения.

Тандемная масс-спектрометрия

Структурная масс-спектрометрия (идентификация органических веществ).

Фрагментация молекул в органической масс-спектрометрии (диссоциация, перегруппировка).

Приемы повышения выхода молекулярного иона.

Изотопные соотношения. Метод изотопного разбавления.

ГХ-МС, ЖХ-МС

Хромато-масс-спектрометрия, ГХ-МС (GC-MS).

Интерфейсы ЖХ-МС. Возможности и ограничения. Области применения.

Реакционная хроматомасс-спектрометрия.

Жидкостная хроматография - масс-спектрометрия, ЖХ-МС (LC-MS).

Интерфейсы ЖХ-МС. Возможности и ограничения.

Сверхкритическая флюидная хроматография - масс-спектрометрия, СФХ-МС (SFC/MS). Интерфейсы СФХ-МС. Возможности и ограничения. Области применения.

Капиллярный электрофорез—масс-спектрометрия, КЭ-МС (CE-MS) Области применения.

5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины

При освоении дисциплины используются следующие образовательные технологии:

- интерактивные лекции с элементами междисциплинарного обучения.
- практические занятия с использованием инновационных методов обучения-неимитационные методы: групповые дискуссии, поисковая лабораторная работа; иммитационные методы: проведение деловой игры.

Адаптивные образовательные технологии, применяемые при обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья и инвалидностью. При обучении студентов с ограниченными возможностями здоровья:

- необходимо создание комфортного психологического климата в студенческой группе;
- обеспечение студентов печатными и электронными образовательными ресурсами;
- проведение текущей и итоговой аттестации с учетом состояния здоровья обучающегося; в случае необходимости – предоставление дополнительного времени для подготовки ответа;
- оказание помощи студенту в организации самостоятельной работы;
- проведение индивидуальных консультаций;
- в случае необходимости содействие обучению по индивидуальному учебному плану или индивидуальному графику обучения.

Наиболее эффективным механизмом обучения является использование компьютерных технологий. Не выходя из дома, студенты с ограниченными возможностями здоровья, могут получать и осваивать учебный материал в спокойной обстановке, в удобном темпе и удобное время.

Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах, определяется главной целью программы, особенностью контингента обучающихся и содержанием конкретных дисциплин, и в целом в учебном процессе они должны составлять не менее 12 аудиторных занятий. Занятия лекционного типа для соответствующих групп студентов не могут составлять более 4 аудиторных занятий.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Самостоятельная работа студентов включает :

- 1) Составление опорных конспектов по теме, различных видов таблиц (концептуальных, сравнительных), «толстых и

тонких вопросов», поиск информации в сети Интернет и справочной литературе.

Изучение дополнительной литературы.

Образец вопросов к семинарам:

1. Принцип метода масс-спектрометрии.
2. Классификация методов по типам источников получения ионов (электронный удар, химическая ионизация, электрораспылительная ионизация, искровая масс-спектрометрия, масс-спектрометрия тлеющего разряда, лазерная масс-спектрометрия, масс-спектрометрия вторичных ионов).
3. Типы масс-анализаторов (статические, динамические, времяпролетные) и основные принципы их работы.
4. Контроль качества пищевых продуктов.
5. Структурная масс-спектрометрия (идентификация органических веществ). Фрагментация молекул в органической масс-спектрометрии (диссоциация, перегруппировка).
6. Приемы повышения выхода молекулярного иона. Изотопные соотношения. Метод изотопного разбавления.
7. Хроматомасс-спектрометрия, ГХ-МС (GC-MS). Интерфейсы ЖХ-МС. Возможности и ограничения.
8. Области применения хроматомасс-спектрометрии.
9. Жидкостная хроматография - масс-спектрометрия, ЖХ-МС (LC-MS). Интерфейсы ЖХ-МС. Возможности и ограничения.

Вопросы к промежуточным отчетам

1. Определение масс-спектрометрии. Особенности метода.
2. Принцип метода масс-спектрометрии.
3. Масс-спектры и их расшифровка.
4. Классификация методов.
5. Идентификация и количественный анализ.
6. Селективность разделения. Разрешение пиков.
7. Типы масс-анализаторов и основные принципы их работы.
8. Квадрупольный масс-анализатор.
9. Ионная ловушка.
10. Времяпролетная масс-спектрометрия.
11. Тандемная масс-спектрометрия.
12. Структурная масс-спектрометрия (идентификация органических веществ).
13. МАЛДИ
14. Области применения хроматомасс-спектрометрии.

7. Данные для учета успеваемости студентов в БАРС

Таблица 1.1. Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности.

1	2	3	4	5	6	7	8	9

Семестр	Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация	Итого
8	10	25	0	20	0	15	30	100

Программа оценивания учебной деятельности студента

8 семестр

Лекции – 0-10 баллов

0-1 баллов – студент посещает менее 60% лекции, не участвует в обсуждении проблемных задач, демонстрирует безразличие к задаваемым вопросам.

2-3 баллов – студент посещает более 60% лекции, не участвует в обсуждении проблемных задач, демонстрирует безразличие к задаваемым вопросам.

4-5 баллов – студент посещает более 70% лекции, редко участвует в обсуждении проблемных задач, делает попытки находить ответы на задаваемые вопросы.

6-7 баллов – студент посещает более 80% лекции, принимает участие в обсуждении проблемных задач, иногда дает правильные ответы к задаваемым вопросам.

8-9 баллов – студент посещает более 90% лекции, почти на каждой лекции участвует в обсуждении проблемных задач, предлагает их решение, в большинстве случаев дает правильный ответ на задаваемые вопросы.

10 баллов – студент посещает все лекции, активно участвует в обсуждении проблемных задач, предлагает нестандартные решения, практически всегда дает правильные ответы на поставленные лектором вопросы.

Лабораторные занятия – 0-25 баллов

0-12 баллов – лабораторная работа сдана значительно позже даты выполнения, значительные ошибки в оформлении и выполнении, которые не были исправлены в короткий срок.

13-20 баллов – лабораторная работа сдана позже даты выполнения, есть незначительные ошибки в оформлении, которые самостоятельно исправлены.

21-25 баллов – лабораторная работа сдана в день ее выполнения, оформлена грамотно и самостоятельно, практически без ошибок.

Практические занятия

Не предусмотрены

Самостоятельная работа – 0-20 баллов

0-8 баллов – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены со значительными ошибками, неполностью. Работа сдана не в срок.

9-15 баллов – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены с незначительными ошибками, полностью. Работа сдана в срок.

16-20 баллов – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены практически без ошибок, полностью. Работа сдана в срок.

Автоматизированное тестирование

Не предусмотрено

Другие виды учебной деятельности (семинары и др.) – 0-15 баллов

0-4 баллов – задания выполнены частично, присутствуют значительные ошибки в решенных заданиях, подход к решению задач выбран неверно.

5-9 баллов – задания выполнены более чем наполовину, могут быть незначительные ошибки, прослеживается правильный подход к решению задач.

10-15 баллов – все задания выполнены, могут быть незначительные ошибки, в целом правильно и грамотно сформулирован подход к решению задач.

Промежуточная аттестация (экзамен) – 0-30 баллов

Промежуточная аттестация проходит в форме экзамена.

ответ на «отлично» оценивается от 25 до 30 баллов;

ответ на «хорошо» оценивается от 20 до 24 баллов;

ответ на «удовлетворительно» оценивается от 10 до 19 баллов;

ответ на «неудовлетворительно» оценивается от 0 до 9 баллов.


Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за восьмой семестр по дисциплине «Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия» составляет 100 баллов.

Таблица 2.2. Таблица пересчета полученной студентом суммы баллов по дисциплине «Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия» в оценку (экзамен):

85-100 баллов	«отлично»
73-84 баллов	«хорошо»
56-72 баллов	«удовлетворительно»
0-55 баллов	«не удовлетворительно»

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия».

а) литература:

1. Аналитическая химия. Хроматографические методы анализа: Учебное пособие / А.И. Жебентяев. - М.: НИЦ Инфра-М; Мн.: Нов. знание, 2013. - 206 с. (ЭБС znanium.com). ✓
2. Хенке Х. Жидкостная хроматография; пер. с нем. Н. Е. Киреевой под ред. А. А. Демина. – М.: Техносфера, 2009. - 263 с. ✓


б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Microsoft Windows Pro 7 (Номер лицензии: OpenLicense № 46312747 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07.) (70 шт.); Microsoft Windows Vista Business Номер лицензии: № 42226296, от 21.12.2009. (21 шт.);
2. Microsoft Office Standard 2003 SP3 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07.) (2 шт.);
3. Microsoft Office Professional 2003 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07); Office 2007 Suites (№ ИОП 47/08 от 07.07.2008) (10 шт.).
4. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса- Стандартный Russian Edition. 1500-2499 Node 1 year Educational Renewal License № лицензии 0B00160530091836187178.

Сайты www.waters.com, www.anchem.ru, <http://www.xumuk.ru/>,
<http://www.nehudlit.ru/books/subcat281.html>

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины «Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия»

- Лекционные аудитории;
- Учебные лаборатории (№28, №31);
- Центр коллективного пользования (№2) Хроматомасс-спектрометр “ТермоFinnigan”);
- Компьютерный класс, оснащенный программным обеспечением: интернет – браузер, Microsoft Office, ISIS Draw; и с выходом в Интернет. (№28а);
- Лабораторная посуда и оборудование;
- Химические реактивы;
- Оверхэд-проекторы;
- Наличие кафедральной библиотеки.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 04.03.01 «Химия» и профилю подготовки «Аналитическая химия и химическая экспертиза».

Автор проф. д.х.н.

Горячева И.Ю.

Программа одобрена на заседании кафедры общей и неорганической химии от 21 мая 2019 года, протокол № 15.