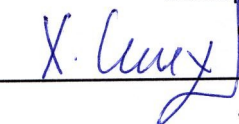


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
органической химии
(Х.С. Шихалиев)


31.08.2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.02.01 Хромато-масс-спектрометрические методы анализа органических соединений

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:**
04.03.01
- 2. Профиль подготовки/специализация:** все профили
- 3. Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра органической химии
- 6. Составители программы:** Крысин Михаил Юрьевич, доктор химических наук, доцент
- 7. Рекомендована:** научно-методическим советом химического факультета, протокол № 6 от 24.05.2018
- 8. Учебный год:** 2018-2019

Семестр(ы): 8

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

на основе современных представлений в области физико-химических методов анализа веществ сформировать у студентов понимание основ и практического применения комплексных методов масс-спектрометрии органических соединений.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина относится к вариативной части, дисциплины по выбору.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ПК-3	владение системой фундаментальных химических понятий	знать: основные закономерности масс-спектрометрической фрагментации органических соединений в сочетании с различными хроматографическими способами ввода образцов; уметь: устанавливать структуру веществ на основании данных масс-спектров; владеть: проведением комплексного исследования органических веществ с применением масс-спектрометрических методов

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 2/72.

Форма промежуточной аттестации – зачет

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)	
	Всего	8 семестр
Аудиторные занятия	48	48
в том числе:		
лекции	24	24
практические	24	24
Самостоятельная работа	24	24
Итого:	72	72
Форма промежуточной аттестации		зачет

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Основные принципы масс-спектрометрии	Методы и системы ввода образцов. Методы ионизации. Ионизация в газовой фазе: электронный удар, химическая ионизация. Десорбционная ионизация: полевая десорбция, бомбардировка быстрыми атомами, плазменная десорбционная ионизация, лазерная десорбционная ионизация. Ионизация при испарении: масс-спектрометрия с термораспылением, масс-спектрометрия с электрораспылением. Анализаторы масс. Магнитные

		секторные масс-спектрометры. Квадрупольные масс-спектрометры. Масс-спектрометры с ионной ловушкой. Времяпролетные масс-спектрометры. Тандемная масс-спектрометрия.
1.2	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	Стабильность ионов и нейтральных частиц. Правило выброса максимального алкильного радикала. Правило Стивенсона-Одье. Правило распада четноэлектронных ионов. Прочность химических связей. Фрагментации. Перегруппировки. Молекулярный ион. Масс-спектры основных классов органических соединений (углеводороды, гидроксилсодержащие соединения, оксосоединения, карбоновые кислоты и их производные, органические соединения азота, гетероциклические соединения).
1.3	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	Газовая хроматография/масс-спектрометрия. Типы хроматограмм с регистрацией ионного тока. Скорость сбора данных. Количественный анализ. Жидкостная хроматография//масс-спектрометрия. Типы масс-спектрометров. Анализ объектов окружающей среды.
1.4	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	Молекулярный ион и изотопные пики в спектрах низкого и высокого разрешения. Молекулярная формула. Индекс водородной ненасыщенности. Азотное правило. Определение содержания изотопа ^{13}C в природных образцах. Расчет изотопной чистоты соединений. Фрагментные ионы. Гомологические серии ионов. Выбросы простейших нейтральных частиц. Наиболее интенсивные пики в масс-спектрах. Библиотеки масс-спектров.
2. Практические занятия		
2.1	Основные принципы масс-спектрометрии	Методы и системы ввода образцов. Методы ионизации. Ионизация в газовой фазе: электронный удар, химическая ионизация. Десорбционная ионизация: полевая десорбция, бомбардировка быстрыми атомами, плазменная десорбционная ионизация, лазерная десорбционная ионизация. Ионизация при испарении: масс-спектрометрия с термораспылением, масс-спектрометрия с электрораспылением. Анализаторы масс. Магнитные секторные масс-спектрометры. Квадрупольные масс-спектрометры. Масс-спектрометры с ионной ловушкой. Времяпролетные масс-спектрометры. Тандемная масс-спектрометрия.
2.2	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	Стабильность ионов и нейтральных частиц. Правило выброса максимального алкильного радикала. Правило Стивенсона-Одье. Правило распада четноэлектронных ионов. Прочность химических связей. Фрагментации. Перегруппировки. Молекулярный ион. Масс-спектры основных классов органических соединений (углеводороды, гидроксилсодержащие соединения, оксосоединения, карбоновые кислоты и их производные, органические соединения азота, гетероциклические соединения).
2.3	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	Газовая хроматография/масс-спектрометрия. Типы хроматограмм с регистрацией ионного тока. Скорость сбора данных. Количественный анализ. Жидкостная хроматография//масс-спектрометрия. Типы масс-спектрометров. Анализ объектов окружающей среды.
2.4	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	Молекулярный ион и изотопные пики в спектрах низкого и высокого разрешения. Молекулярная формула. Индекс водородной ненасыщенности. Азотное правило. Определение содержания изотопа ^{13}C в природных образцах. Расчет изотопной чистоты соединений. Фрагментные ионы. Гомологические серии ионов. Выбросы простейших нейтральных частиц. Наиболее интенсивные пики в масс-спектрах. Библиотеки масс-спектров.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1	Основные принципы масс-спектрометрии	4	4	-	10	18
2	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	10	10	-	20	40
3	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	4	4	-	10	18
4	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	4	4	-	24	32
Итого:		22	22	-	64	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

Организация изучения дисциплины предполагает:

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- решение задач;

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды / А.Т. Лебедев. - М.: Техносфера , 2013. – 632 с. – URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=235731&sr=1

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Преч Э. Определение строения органических соединений / Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффольтер ; пер. с англ. Б.Н. Тарасевича .— М. : Мир : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006 .— 439 с.
3	Лебедев, А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии : Учебное пособие для студ. вузов, обуч. по специальности 011004- Органическая химия / А. Т. Лебедев .— М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003 .— 493 с.
4	Основы масс-спектрометрии органических соединений / В. Г. Заикин, А. В. Варламов, А. И. Микая, Н. С. Простаков; Рос. акад. наук. Ин-т нефтехим. синтеза им. А. В. Топчиева .— М. : Наука, 2001 .— 285 с.
5	Казицына Л. А. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс-спектроскопии в органической химии : учеб. пособие для студентов хим. специальностей ун-тов / Л. А. Казицына, Н. Б. Куплетская. — М. : Изд-во МГУ, 1979. — 236 с.

в) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:

№ п/п	Источник
6	American Chemical Society ACS Publications - полнотекстовая база данных научных

	журналов, http://pubs.acs.org
7	Электронно-библиотечная система "Университетская библиотека online" URL: http://biblioclub.ru/
8	Royal Society of Chemistry The Royal Society of Chemistry (RSC) - полнотекстовая база данных научных журналов, http://www.rsc.org/Publishing/Journals/Index.asp

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Современные методы синтеза гетероциклических соединений : учебно-методическое пособие для вузов / сост. : Х.С. Шихалиев, М.Ю. Крысин, Н.В. Столповская, А.В. Зорина .— Воронеж : Издательско-полиграфический центр Научная книга, 2012 .— 21 с.

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Компьютер и мультимедийные установки, ГХ-масс-спектрометры, ВЭЖХ-масс-спектрометры.

19. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС (средства оценивания)
ПК-3 Владением системой фундаментальных химических понятий	Знать: основные закономерности масс-спектрометрической фрагментации органических соединений в сочетании с различными хроматографическими способами ввода образцов.	Закономерности масс-спектрометрической фрагментации органических соединений в сочетании с различными хроматографическими способами ввода образцов.	Устный опрос
	Уметь: устанавливать структуру веществ на основании данных масс-спектров	Установление структуры веществ на основании данных масс-спектров	Устный опрос
	Владеть: проведением комплексного исследования органических веществ с применением масс-спектрометрических методов	Комплексное исследование органических веществ с применением масс-спектрометрических методов	Устный опрос
Промежуточная аттестация			КИМ

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

- 1) знание основных принципов масс-спектрометрии;
- 2) знание основных принципов фрагментации молекулярных ионов;
- 3) знание методов подготовки образцов и регистрации масс-спектров;
- 4) знание основных принципов расшифровки масс-спектров;
- 5) владение способностью иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

Для оценивания результатов обучения на зачете с оценкой используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет понятийным аппаратом дисциплины, но допускает отдельные ошибки при ответах на вопросы.	Базовый уровень	Хорошо
Обучающийся частично владеет теоретическими основами дисциплины, не умеет применять теоретические знания для решения практических задач.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.	–	Неудовлетворительно

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к зачету:

1. Методы и системы ввода образцов
2. Молекулярный ион и изотопные пики в спектрах низкого и высокого разрешения. Молекулярная формула. Индекс водородной ненасыщенности..
3. Ионизация в газовой фазе: электронный удар, химическая ионизация
4. Азотное правило. Определение содержания изотопа ^{13}C в природных образцах. Расчет изотопной чистоты соединений.
5. Десорбционная ионизация: полевая десорбция, бомбардировка быстрыми атомами, плазменная десорбционная ионизация, лазерная десорбционная ионизация
6. Фрагментные ионы. Гомологические серии ионов. Выбросы простейших нейтральных Частиц
7. Ионизация при испарении: масс-спектрометрия с термораспылением, масс-спектрометрия с электрораспылением.
8. Прочность химических связей. Фрагментации. Перегруппировки. Молекулярный ион
9. Анализаторы масс. Магнитные секторные масс-спектрометры. Квадрупольные масс-спектрометры. Масс-спектрометры с ионной ловушкой. Времяпролетные масс-спектрометры
10. Тандемная масс-спектрометрия.
11. Масс-спектры основных классов органических соединений (углеводороды).
12. Стабильность ионов и нейтральных частиц. Правило выброса максимального алкильного радикала. Правило Стивенсона-Одье. Правило распада четноэлектронных ионов.
13. Масс-спектры основных классов органических соединений (гидроксилсодержащие соединения).
14. Газовая хроматография/масс-спектрометрия. Типы хроматограмм с регистрацией ионного тока.
15. Масс-спектры основных классов органических соединений (карбоновые кислоты и их производные).
16. Жидкостная хроматография/масс-спектрометрия.

17. Масс-спектры основных классов органических соединений (азотдержащие соединения).
18. Масс-спектры основных классов органических соединений (карбонильные соединения).

19.3.2 Перечень практических заданий

19.3.3 Тестовые задания

19.3.4 Перечень заданий для контрольных работ

19.3.5 Темы курсовых работ

19.3.6 Темы рефератов

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме устного опроса, решения задач, тестирования. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.