

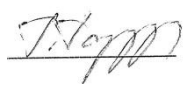
МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры АХ
протокол № 15 от «17» марта 2020 г.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета

Зав. кафедрой  /Майстренко В.Н. /

 /Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1. В.02 Масс – спектрометрия. Хромато-масс-спектрометрия

Часть, формируемая участниками образовательных отношений

программа специалитета

Направление подготовки (специальность)
04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Направленность (профиль) подготовки
Аналитическая химия

Квалификация
Химик. Преподаватель-химик.

Разработчик (составитель) Ст. преподаватель кафедры аналитической химии, к.х.н. (должность, ученая степень, ученое звание)	 /Аллаярова Д.А. (подпись, Фамилия И.О.)
---	---

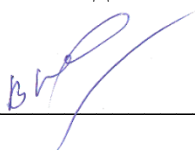
Дата приема: 2020 г.

Уфа 2020 г.

Составитель / составители: к.х.н., ст. преподаватель Аллаярова Д.А.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры аналитической химии протокол № 15 от «17» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой

 / Майстренко В.Н.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)
4. Фонд оценочных средств по дисциплине
 - 4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.
 - 4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины
 - 5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины
 - 5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенции (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
	ПК-2. Владением навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК-2.1. Знать оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных физико-химических свойств веществ.	Знать: оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных физико-химических свойств веществ.
		ПК-2.2. Уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Уметь: проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.
		ПК-2.3. Владеть основами пробоподготовки для проведения различных физико-химических анализов	Владеть: основами пробоподготовки для проведения различных физико-химических анализов
		ПК-2.4 Владеть начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием
	ПК-3. Владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания	ПК-3.1. Знать основные понятия и законы химии	Знать: Основные понятия и законы химии
		ПК-3.2. Уметь применять основные законы химии	Уметь: Применять основные законы химии
		ПК-3.3. Владеть системой фундаментальных понятий химии.	Владеть: Системой фундаментальных понятий химии.
	ПК-4. способностью применять	ПК-4.1. Знать основные законы химии и смежных наук	Знать: основные законы химии и смежных наук

	основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов	ПК-4.2 Уметь применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	Уметь: применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов
		ПК-4.3. Владеть основными методами анализа и обработки полученных результатов	Владеть: основными методами анализа и обработки полученных результатов

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Масс – спектрометрия. Хромато-масс-спектрометрия» относится части, формируемой участниками образовательных отношений

Дисциплина изучается на 5 курсе в 9 семестре.

Цели изучения дисциплины: формирование практических знаний и умений при проведении аналитических исследований в различных направлениях специализации, в частности, в области контроля производственных процессов, мониторинга объектов окружающей среды, контроля качества продукции, анализе материалов, биологических сред, фармацевтических препаратов и т.д. В результате обучения студент должен научиться ориентироваться в инструментальных методах анализа, знать их возможности и ограничения, уметь применять эти методы при решении поставленных задач.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин:

- Б1.Б.07 Физика
- Б1.Б.08 Неорганическая химия
- Б1.Б.09 Аналитическая химия
- Б1.Б.10 Органическая химия
- Б1.Б.11 Физическая химия
- Б1.Б.13 Химическая технология
- Б1.В.1.03 Хроматография
- Б1.В.1.02 Химические основы экологии
- Б1.Б.14 Высокомолекулярные соединения

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций и индикаторов с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и формулировка компетенции **ПК-2. Владением навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований**

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
ПК-2.1. Знать оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных физико-химических свойств веществ.	Знать: оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных физико-химических свойств веществ.	Затрудняется в определении и назначении компонентов прибора и программ.	Самостоятельно определяет компоненты приборов. Имеет представления о нормальном режиме их функционирования при проведении отдельных операций	Самостоятельно определяет компоненты приборов. Имеет представления о нормальном режиме их функционирования. Применяет компьютерные программы для управления прибором	Самостоятельно подключает компоненты приборов. Имеет представления о нормальном и критическом режимах их функционирования. Способен диагностировать простые ошибки приборов и программ управления
ПК-2.2. Уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Уметь: проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Затрудняется в проведении эксперимента на научном оборудовании использовании специализированных программ	Проводит отдельные операции в ходе эксперимента на научном оборудовании без обработки результатов измерений в специализированных компьютерных программах.	Проводит отдельные операции в ходе эксперимента на научном оборудовании без обработки результатов измерений в специализированных компьютерных программах.	Самостоятельно осуществляет все этапы эксперимента на научном оборудовании, проводит обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.
ПК-2.3. Владеть основами	Владеть: основами пробоподготовки для	Затрудняется в подготовке проб и объектов для последующего	Выполняет отдельные операции в ходе	Самостоятельно выполняет большинство операций в	Самостоятельно способен осуществить полный цикл

пробоподготовки для проведения различных физико-химических анализов	проведения различных физико-химических анализов	исследования. Затрудняется в порядке включения и выключения прибора, снятии показаний измерений	пробоподготовки. Проводит измерения, не способен изменять параметры прибора.	ходе пробоподготовки простых объектов Самостоятельно готовит прибор к запуску, контролирует и изменяет параметры прибора в ходе эксперимента .	пробоподготовки Способен к проведению полного цикла работ на специализированном научном оборудовании при проведении эксперимента в невысокой сложности
ПК-2.4 Владеть начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Затрудняется в подготовке проб и объектов для последующего исследования. Затрудняется в порядке включения и выключения прибора, снятии показаний измерений	Выполняет отдельные операции в ходе пробоподготовки. Проводит измерения, не способен изменять параметры прибора.	Самостоятельно выполняет большинство операций в ходе пробоподготовки простых объектов Самостоятельно готовит прибор к запуску, контролирует и изменяет параметры прибора в ходе эксперимента .	Самостоятельно способен осуществить полный цикл пробоподготовки Способен к проведению полного цикла работ на специализированном научном оборудовании при проведении эксперимента в невысокой сложности

Код и формулировка компетенции **ПК-3.** Владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
ПК-3.1. Знать основные понятия и законы химии	Знать: Основные понятия и законы химии	Знания носят фрагментарный характер	Знание базовых и понятий и законов химической науки.	В целом сформированные знания о системе фундаментальных химических	Сформированное и систематизированное представление о химической науке

				понятий, содержащие некоторые пробелы.	
ПК-3.2. Уметь применять основные законы химии	Уметь: Применять основные законы химии	Частично освоенное умение решать стандартные задачи на применение фундаментальных химических понятий и законов	В целом успешно, но не системное умение решать стандартные задачи на применение фундаментальных химических понятий и законов	В целом успешное, но содержащие отдельные пробелы умение решать стандартные задачи на применение фундаментальных химических понятий и законов	Сформированное умение решать стандартные задачи на применение фундаментальных химических понятий и законов
ПК-3.3. Владеть системой фундаментальных понятий химии.	Владеть: Системой фундаментальных понятий химии.	Фрагментарное владение системой фундаментальных химических понятий	В целом успешное, но не системное владение системой фундаментальных химических понятий	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы или сопровождающееся отдельными ошибками владение системой фундаментальных химических понятий	Успешное и системное владение системой фундаментальных химических понятий

Код и формулировка компетенции **ПК-4.** Способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
ПК-4.1. Знать основные законы химии и смежных наук	Знать: основные законы химии и смежных наук	Имеет представление об основных химических законах	Знает некоторые понятия и законы химии и смежных наук	Знание о естественных законах и закономерностях развития химической науки в целом полные, но содержат некоторые	Полные и системные знания о естественных законах и закономерностях развития химической науки

				пробелы.	
ПК-4.2 Уметь применять основные естественн аучные законы и закономернос ти развития химической науки при анализе полученных результатов	Уметь: применять основные естественн аучные законы и закономернос ти развития химической науки при анализе полученных результатов	Частично освоенное умение применять естественнауч ные законы	В целом успешно, но не системное умение решать типичные задачи, связанные с обработкой и анализом полученных результатов	В целом успешное, но содержащие отдельные пробелы умение решать типичные задачи, связанные с обработкой и анализом полученных результатов	Сформирован ное умение решать типичные задачи, связанные с применением естественн аучных законов и закономернос тей развития химической науки при анализе полученных результатов
ПК-4.3. Владеть основными методами анализа и обработки полученных результатов	Владеть: основными методами анализа и обработки полученных результатов	Фрагментарное владение навыками анализа и обработки результатов	В целом успешное, но не системное владение навыками анализа и обработки результатов	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы или сопровождаю щеея отдельными ошибками владение навыками анализа и обработки результатов	Успешное и системное владение навыками применения основных естественн аучные законы и закономернос тей развития химической науки при анализе полученных результатов

Шкалы оценивания:

для экзамена:

от 45 до 59 баллов – «удовлетворительно»;

от 60 до 79 баллов – «хорошо»;

от 80 баллов – «отлично».

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК-2.1. Знать оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных физико-химических	Знать: оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных физико-химических свойств веществ.	Опрос Лабораторная работа

свойств веществ.		
<i>ПК-2.2.</i> Уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Уметь: проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Лабораторная работа Контрольная работа
<i>ПК-2.3.</i> Владеть основами пробоподготовки для проведения различных физико-химических анализов	Владеть: основами пробоподготовки для проведения различных физико-химических анализов	Лабораторная работа
<i>ПК-2.4.</i> Владеть начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Лабораторная работа
<i>ПК-3.1.</i> Знать основные понятия и законы химии	Знать: Основные понятия и законы химии	Опрос Тестовые задания
<i>ПК-3.2.</i> Уметь применять основные законы химии	Уметь: Применять основные законы химии	Опрос Тестовые задания Контрольная работа
<i>ПК-3.3.</i> Владеть системой фундаментальных понятий химии.	Владеть: Системой фундаментальных понятий химии.	Опрос Тестовые задания
<i>ПК-4.1.</i> Знать основные законы химии и смежных наук	Знать: основные законы химии и смежных наук	Опрос Тестовые задания Контрольная работа
<i>ПК-4.2.</i> Уметь применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	Уметь: применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	Опрос Тестовые задания Лабораторная работа
<i>ПК-4.3.</i> Владеть основными методами анализа и обработки полученных результатов	Владеть: основными методами анализа и обработки полученных результатов	Лабораторная работа Контрольная работа

Примерные вопросы и задания для опроса

1. Характеристика основных блоков хромато-масс-спектрометра.
2. Хроматограф. Типы колонок для ХМС анализа. Требования к неподвижной жидкой фазе. Типы неподвижных жидких фаз.
3. Газ-носитель для ХМС-анализа. Характеристика современных хромато-масс-спектрометров.

4. Классификация интерфейсов, их устройство, принцип действия, достоинства и недостатки.
 5. Масс-анализаторы: магнитный, квадрупольный, времяпролетный. Схемы, принцип работы, достоинства, недостатки.
 6. Основные правила фрагментации органических соединений в ХМС.
 7. Источник ионов и способы ионизации, ионизация электронным ударом и химическая ионизация.
 8. Предварительная обработка и оптимизация получения спектрограмм.
 9. Групповая идентификация органических соединений с помощью гомологических серий.
 10. Классификация органических соединений по спектрам ионных серий.
 11. Хроматографические параметры удерживания. Логарифмические, арифметические, молекулярные индексы удерживания.
 12. Общая характеристика масс-спектра и анализ области молекулярного иона.
 13. Схемы фрагментации гетероциклических соединений при электроударной ионизации
 14. Распад галоген- и азотсодержащих органических соединений при электронном ударе.
 15. Распад кислородсодержащих органических соединений при электронном ударе.
 16. Фрагментация серусодержащих органических соединений при ЭУ ионизации
 17. Количественный анализ в ХМС. Метод внутреннего и внешнего стандартов.
 18. Получение производных или химическая модификация органических соединений для ХМС-анализа.
 19. Использование ЭВМ для обработки данных масс- и хромато-масс-спектральных данных.
 20. Качественный анализ. Библиотечный поиск: прямой и обратный. Характеристика экспертных и интерпретирующих программ.
 21. Использование сигналов изотопных пиков для определения брутто-формулы органического соединения.
 22. Анализ следовых количеств органических веществ в ХМС. Масс-фрагментография.
 23. Типы ионов в хромато-масс-спектрометрии. Примеры образования перегруппировочных ионов.
 24. Парофазный анализ и микротвердофазное концентрирование как методы пробоподготовки в ХМС.
- 6.2. Вопросы к итоговому контролю
1. Составные части хромато-масс-спектрометра, их функции и назначение.
 2. Масс-анализаторы: магнитный, квадрупольный. Схемы, принцип работы, достоинства и недостатки.
 3. Классификация интерфейсов, их устройство, принцип действия.
 4. Источник ионов и способы ионизации. Ионизация ЭУ и химическая ионизация, их достоинства и недостатки.
 5. Основные требования к газу-носителю, неподвижной жидкой фазе в ХМС. Характеристика современных хромато- масс- спектрометров

6. Использование ЭВМ для обработки данных масс-и хромато-масс-спектрометрии
7. Химическая ионизация органических соединений. Достоинства и недостатки. Методы повышения селективности химической ионизации.
8. Общая характеристика спектра и анализ области пика молекулярного иона
9. Химическая модификация органических соединений для хромато-масс-спектрометрического анализа
10. Групповая идентификация органических соединений с помощью гомологических серий.
11. Классификация органических соединений по спектрам ионных серий.
12. Основные представления о закономерностях фрагментации органических соединений при ЭУ. Перегруппировочные процессы.
13. Перегруппировка Мак-Лафферти в кислородсодержащих и ароматических органических соединениях
14. Логарифмические, арифметические и молекулярные индексы удерживания, использование параметров удерживания при ХМС-анализе.
15. Определение брутто-формулы органических соединений по масс-спектрам.
16. Предварительная обработка и оптимизация условий получения спектрограмм
17. Анализ следовых количеств органического вещества в ХМС. Масс-фрагментография.
18. Особенности пробоподготовки и анализа загрязнений воды и почвы.
19. Определение молекулярной массы по масс-спектру. Азотное правило.
20. Парофазный анализ . Сущность метода, область применения.
21. Схема времяпролетного масс-анализатора. Принцип работы, достоинства, применение
22. Требования к неподвижной жидкой фазе, характеристика основных видов хроматографических колонок в ХМС.
23. Основные типы ионов в хромато-масс-спектрометрии. Примеры образования главных осколочных и перегруппировочных ионов в ХМС.
24. Количественный анализ в хромато-масс-спектрометрии.
Выбор характеристических ионов для кислородсодержащих органических соединений
25. Ионный источник масс-спектрометра. Требования к ионному источнику. Основное предназначение ионного источника. Принцип его работы
26. Количественный анализ в ХМС. Типы внутренних стандартов
27. Основные реакции дериватизации органических соединений для повышения эффективности ХМС-анализа

При оценке знаний студента по дисциплине используется балльно-рейтинговая система.

Критерии оценивания:

2 балла – студент получает, если ответил на все поставленные вопросы в полной мере, с пониманием материала.

1 балл – студент получает, если допускает ошибки при ответах, дает не полные ответы, отсутствует понимание некоторой части материала.

0 баллов – у студента отсутствует знание материала.

Вопросы к экзамену по курсу «Основы масс- и хромато-масс-спектрометрии»

1. Составные части хромато-масс-спектрометра, их функции и назначение.
2. Масс-анализаторы: магнитный, квадрупольный. Схемы, принцип работы, достоинства и недостатки.
3. Классификация интерфейсов, их устройство, принцип действия.
4. Источник ионов и способы ионизации. Ионизация ЭУ и химическая ионизация, их достоинства и недостатки.
5. Основные требования к газу-носителю, неподвижной жидкой фазе в х ГЖХ, ХМС.
6. Общая характеристика спектра и анализ области пика молекулярного иона
7. Химическая модификация органических соединений для хромато-масс-спектрометрического анализа
8. Основные представления о закономерностях фрагментации органических соединений при ЭУ. Перегруппировочные процессы.
9. Перегруппировка Мак-Лафферти в кислородсодержащих и ароматических органических соединениях
10. Параметры удерживания: расстояние удерживания, время удерживания, исправленный, относительный, удельный удерживаемый объем хроматографируемых соединений.
11. Логарифмические индексы удерживания, использование параметров удерживания при ХМС-анализе.
12. Определение брутто-формулы органических соединений по масс-спектрам.
13. Анализ следовых количеств органического вещества в ХМС. Селективное ионное детектирование. Масс-фрагментография.
14. Особенности пробоподготовки и анализа загрязнений воды и почвы.
15. Определение молекулярной массы по масс-спектру. Азотное правило.
16. Парофазный анализ. Сущность метода, область применения.
17. Схема времяпролетного масс-анализатора. Принцип работы, достоинства, применение
18. Требования к неподвижной жидкой фазе в ГЖХ и ХМС, характеристика основных видов хроматографических колонок в ХМС.
19. Основные типы ионов в хромато-масс-спектрометрии. Примеры образования главных осколочных и перегруппировочных ионов в ХМС.
20. Количественный анализ в хромато-масс-спектрометрии.
Выбор характеристических ионов для кислородсодержащих органических соединений
21. Ионный источник масс-спектрометра. Требования к ионному источнику. Основное предназначение ионного источника. Принцип его работы
22. Количественный анализ в ХМС. Типы внутренних стандартов
23. Основные реакции дериватизации органических соединений для повышения эффективности ХМС-анализа

Пример экзаменационного билета

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Башкирский государственный университет»

Экзамен по специальному курсу 201_-201_ уч.год, 7 семестр

Дисциплина «*Основы масс - и хромато-масс-спектрометрии*»

Билет № 1

1. Блок-схема хромато-масс-спектрометра. Характеристика и назначение каждого блока.
2. Перегруппировочные процессы в кислородсодержащих органических соединениях. Образование характеристических потерь и главных перегруппировочных осколков.

Зав.кафедрой аналитической химии

В.Н. Майстренко

Перевод оценки из 100-балльной в четырех балльную производится следующим образом:

- отлично – от 80 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- хорошо – от 60 до 79 баллов;
- удовлетворительно – от 45 до 59 баллов;
- неудовлетворительно – менее 45 баллов.

Критерии оценки (в баллах):

- **25-30 баллов** выставляется студенту, если студент дал полные, развернутые ответы на все теоретические вопросы билета, продемонстрировал знание функциональных возможностей, терминологии, основных элементов, умение применять теоретические знания при выполнении практических заданий. Студент без затруднений ответил на все дополнительные вопросы. Практическая часть работы выполнена полностью без неточностей и ошибок;

- **17-24 баллов** выставляется студенту, если студент раскрыл в основном теоретические вопросы, однако допущены неточности в определении основных понятий. При ответе на дополнительные вопросы допущены небольшие неточности. При выполнении практической части работы допущены несущественные ошибки;

- **10-16 баллов** выставляется студенту, если при ответе на теоретические вопросы студентом допущено несколько существенных ошибок в толковании основных понятий. Логика и полнота ответа страдают заметными изъянами. Заметны пробелы в знании основных методов. Теоретические вопросы в целом изложены достаточно, но с пропусками материала. Имеются принципиальные ошибки в логике построения ответа на вопрос. Студент не решил задачу или при решении допущены грубые ошибки;

- **1-10 баллов** выставляется студенту, если ответ на теоретические вопросы свидетельствует о непонимании и крайне неполном знании основных понятий и методов. Обнаруживается отсутствие навыков применения теоретических знаний при выполнении практических заданий. Студент не смог ответить ни на один дополнительный вопрос.

Вопросы для семинаров

Занятие № 1. Характеристика основных сигналов масс-спектра

1. Молекулярный, дочерний ионы
2. Сигналы изотопных ионов. Использование их при определении общей формулы вещества
3. Решение задач

Занятие № 2. Основные правила в масс-спектрометрии

1. Правило Ственсона-Одье
2. Азотное правило
3. Решение задач

Занятие № 3. Правила фрагментации органических соединений

1. Правила фрагментации спиртов
2. Правила фрагментации сложных и простых эфиров
3. Решение задач

Занятие № 4 Механизмы распадов и перегруппировочных процессов при электронно-ударной ионизации азот-и кислород-органических соединений

1. Механизм распада эфиров(простых и сложных) ,кетонов, аминов, карбоновых кислот
2. Перегруппировочные процессы при образовании характеристических потерь
3. Решение задач

Занятие № 4 Перегруппировки в органических соединений при ЭУ ионизации

1. Перегруппировка Мак-Лафферти в органических соединениях при ЭУ
2. Использование характеристических ионов масс-спектра для структурного анализа
3. Решение задач

Критерии оценки работа студента на семинаре (в баллах)

- 2 балла выставляется студенту, если он верно отвечает на поставленный вопрос;
- 1 баллов выставляется студенту, если ..отвечает верно,но допускает незначительные ошибки;
- 0 баллов выставляется студенту, если не знает материала занятия.;

Задания для контрольной работы

Описание контрольной работы:

Письменная контрольная работа №1 .Схемы распада азот, серу- и галогенсодержащих содержащих органических соединений.)

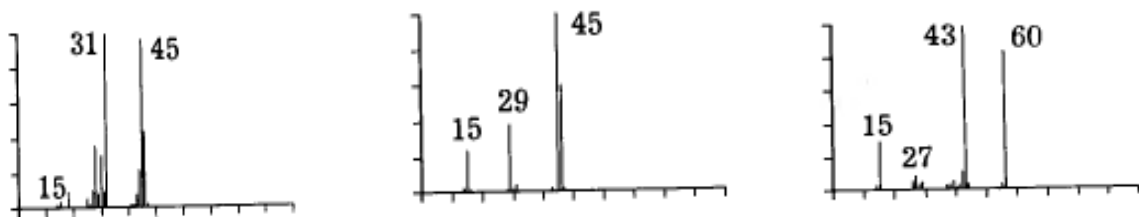
Письменная контрольная работа №2. Схемы распада углеводородов и кислородсодержащих органических соединений.

Пример 1 варианта контрольной работы:

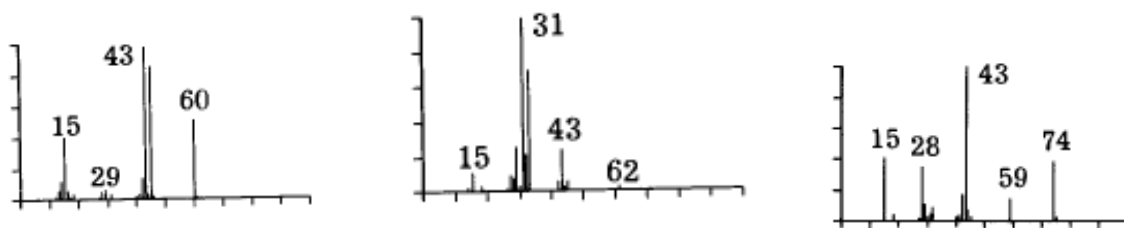
1. Определите строение органического соединения по данным масс-спектра: m/z 88 (2,5), 87 (1,5), 74 (4), 73 (31), 70 (2), 61 (5), 60 (100), 55 (9), 45 (17), 44 (4), 43 (20), 42 (22), 41 (23), 40 (2), 39 (13), 38 (3), 29 (14).
2. Определите структуру вещества по данным масс-спектра (m/z): 176 (50), 148 (25), 131 (100), 103 (65), 77 (48), 51 (38).
3. Определите элементный состав соединения с молекулярной массой 137, если интенсивности сигналов с m/z 137 и 138 равны 76% и 6,2% соответственно.

Пример 2 варианта контрольной работы:

- 1.Определите строение органического соединения по масс-спектру:



2. Распишите основные реакции распада и перегруппировок в этилацетате, пропилбензоле, валерьяновой кислоте
3. Расшифруйте масспектры соединений, полученных при электроно-ударной ионизации:



Описание методики оценивания контрольной работы студента:

Критерии оценки (в баллах)

- 5 баллов выставляется студенту, если задание выполнено полностью, без ошибок.
- 4 балла выставляется студенту, если задание выполнено, но есть незначительные ошибки ..
- 3 балла выставляется студенту, если выполнено задание наполовину.
- 2 балла выставляется студенту, если студент решил одну задачу
- 1 балл выставляется студенту, если студент сделал правильную попытку решить задачи
- 0 баллов выставляется студенту, если задание не выполнено.

и т.д. (Аналогично описываются все остальные оценочные средства)

Тестовый промежуточный контроль

Тестовые задания по дисциплине

- 1) Какое явление лежит в основе масс-спектрометрии ?
 - А. Электронные переходы
 - Б. Изменения состояния спинов атомных ядер
 - В. Диссоциация молекул
 - Г. Изменение колебательно-вращательных уровней молекулы
- 2) Процесс разделения соединений смеси в хромато-масс-спектрометре происходит в:
 - А. Ионном источнике
 - Б. Хроматографической колонке
 - В. Масс-анализаторе
 - Г. В интерфейсе
- 3) Разделение ионов согласно отношению m/z происходит в:
 - А. Ионном источнике

- Б. Интерфейсе
В. Масс-анализаторе
Г. В хроматографической колонке
- 4) В интерфейсе происходит:
А. Разделение ионов
Б. Обогащение пробы
В. Фрагментация молекул
Г. Очистка пробы от примесей
- 5) Согласно «азотному правилу» молекула органического соединения при нечетной ее массе:
А. Содержит азот в четном числе
Б. Не содержит азот
В. Содержит азот в нечетном количестве
Г. Содержит четное число атомов азота и кислорода
- 6) Число атомов углерода в органическом веществе определяют по интенсивности изотопного иона:
А. $M+1$
Б. $M+2$
В. $M+4$
Г. $M+6$
- 7) При наличии одного атома брома в молекуле органического вещества соотношение интенсивности изотопных ионов ($M+1$) и ($M+2$) равно:
А. 3:1
Б. 1:1
В. 1:3
Г. 2:1
- 8) Характеристическая потеря с m/z , равной 18 а.е.м. характерна для:
А. Алканов
Б. Аренов
В. Спиртов
Г. Аминов
- 9) Перегруппировка Мак-Лафферти характерна для следующей пары веществ:
А. Алканы, карбоновые кислоты
Б. Арены, кетоны
В. Простые эфиры, циклоалканы
Г. Сложные эфиры, изо-спирты
- 10) Характеристический ион с m/z 60 а.е.м. образуется при ионизации :
А. Алкенов
Б. Аренов
В. Карбоновых кислот
Г. Аминов
- 11) Характеристический ион с m/z 92 а.е.м. образуется при ионизации :
А. Алканов
Б. Сложных эфиров
В. Аренов
Г. Спиртов

- 12) Ониеый распад характерен для :
- А. Аминов
 - Б. Альдегидов
 - В. Карбоновых кислот
 - Г. Сложных эфиров
- 13) Заряд локализуется при ионизации ЭУ на фрагменте, имеющем меньший потенциал ионизации согласно правилу:
- А. Мак-Лафферти
 - Б. Стивенсона_ - Одье
 - В. Одье –Мартина
 - Г. Мартина Лютера
- 14) Спектр ионных серий органического вещества состоит из:
- А. 10
 - Б. 12
 - В. 14 серий
 - Г. 20
- 15) Качественный и количественный анализ в ХМС проводят по:
- А. Молекулярному иону
 - Б. Характеристическому иону
 - В. Изотопному иону
 - Г. По характеристической потере
- 16) При фрагментации каких соединений характерно образование иона тропиллия:
- А. Циклогексана
 - Б. бензола
 - В. Гептана
 - Г. Дифенила
- 17) От чего зависит устойчивость молекулярного иона
- А. От устойчивости образованного иона
 - Б. От мощности источника излучения
 - В. От концентрации исследуемого вещества
 - Г. От агрегатного состояния вещества
- 18) Легче подвергаются ионизации
- А. Ароматические соединения
 - Б. Алканы
 - В. Спирты
 - Г. Карбоновые кислоты
- 19) При фрагментации каких молекул образуется нейтральная частица HCN:
- А. Амидов ароматических кислот
 - Б. Нитросоединений
 - В. Ароматических соединений
 - Г. N- гетероциклических соединений
- 20) Одно из важнейших требований к масс-анализатору в ХМС:
- А. Дешевизна
 - Б. Доступность
 - В. Скорость сканирования
 - Г. Легкость в эксплуатации

Описание методики оценивания контрольной работы студента:

5 баллов выставляется студенту, если задание выполнено полностью, без ошибок.

_4__ балла выставляется студенту, если задание выполнено, но есть незначительные ошибки

3 балла выставляется студенту, если выполнено задание наполовину.

2 балла выставляется студенту, если студент правильно ответил на 8 вопросов теста

1 балл выставляется студенту, если студент правильно ответил на 5 вопросов теста

0_ баллов выставляется студенту, если задание не выполнено.

Рейтинг-план дисциплины
«Масс – спектрометрия. Хромато-масс-спектрометрия»
Направление подготовки (специальность)
04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»
Направленность (профиль) подготовки
Аналитическая химия
5 курс. 9 семестр

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Модуль 1				
Текущий контроль				
1. Аудиторная работа (опрос)	2	5	0	10
2. Лабораторная работа	3	4		12
3. Тестовый контроль	4	1	0	4
Рубежный контроль				
1. Письменная контрольная работа №1	5	1	0	5
2.Письменная контрольная работа №2	5	1		5
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Аудиторная работа	2	5	0	10
2. Лабораторная работа	3	4		12
2. Тестовый контроль	5	1	0	5
Рубежный контроль				
1. Письменная контрольная работа (зачётная)	7	1	0	7
Поощрительные баллы				
1. Студенческая олимпиада	10			
2. Публикация статей	10			
3. Работа со школьниками (кружок, конкурсы, олимпиады)	10			
Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)				
1. Посещение лекционных занятий	-0,4	15	0	-6
Итоговый контроль				
2. Экзамен	30	1	0	30

- за пропуски лекционных занятий
- за 25 % пропусков вычитается 1 балл
- за 50 % пропусков вычитается 4 балла
- за 75 % пропусков вычитается 6 баллов
- за 100 % пропусков – студент не допускается до итоговых испытаний

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды. Москва: Техносфера. 2013. 632 с. <https://e.lanbook.com/reader/book/73535/#1>
2. Ширяева Р. Н., Валинурова Э. Р., Гайнуллина Ю. Ю. Масс-спектрометрический метод анализа [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Башкирский государственный университет. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2018. https://elib.bashedu.ru/dl/local/Shirjaeva%20i%20dr_Mass-spektrometriceskij%20metod_up_2018.pdf/info
3. Золотов Ю.А. Основы аналитической химии. 2 том. М.: Высш.шк, 2010. www.bashedu.bibliotech.ru/Reader/Book/8167

Дополнительная литература:

1. Валинурова Э.Р., Резник Л.Б. Методическое указание по использованию масс-спектрометрии в структурных исследованиях органических соединений. Уфа. РИЗО БашГУ. 2000.40 с
2. Исидоров В.А., Зенкевич И.Г. Хромато-масс-спектрометрическое определение следов органических веществ в атмосфере. Л.: 1982.
3. Бейнон Дж. Масс-спектрометрия и ее применение в органической химии. М.: 1965.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специальных* помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	2	3
1.учебная аудитории для проведения занятий лекционного типа: аудитория №001 (химфак корпус), №002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), № 007 (химфак корпус), № 008 (химфак корпус), аудитория №305 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), № 311 (химфак корпус), № 405 (химфак корпус). 2.учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций: аудитория №001 (химфак корпус), №002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), № 007 (химфак корпус), № 008 (химфак корпус), аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311(химфак корпус), аудитория № 310(химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус) 3. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория №001 (химфак корпус), №002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), № 007 (химфак корпус), № 008 (химфак корпус). аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311(химфак корпус), аудитория № 310(химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус) 4.помещение для самостоятельной работы: читальный зал № 1 (главный корпус), читальный зал № 2 (физмат корпус-учебное), читальный зал № 5 (гуманитарный корпус), читальный зал № 6 (учебный корпус), читальный зал № 7	Аудитория №001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска Аудитория №002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска Аудитория №007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска Аудитория 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска Аудитория №305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183 Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183 Аудитория №311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска,мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic Читальный зал №1 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, Неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76. Читальный зал №2 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., Неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50. Читальный зал №5 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27. Читальный зал №6 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД;	1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензиибессрочные 2. MicrosoftOfficeStandard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные

(гуманитарный корпус), лаборатория № 105 (химфак корпус). 5.помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: лаборатория 318 (химфак корпус)	количество посадочных мест – 30. Читальный зал №7 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18. Лаборатория №105 Учебная мебель, Генератор водорода, Насос вакуумный, Весы лабораторные ONAUSPA-214 С, Аналого-цифровой преобразователь АЦП-2, Деионизатор воды ДВ-10UV, Комплекс хроматографический газовый «ХРОМОС» GX-1000 , Компрессор, Магнитная мешалка 3-х секционная с подогревом ULABUS-3110, Магнитная мешалка MS-H280-Pro, Автоматический поляриметр AtagoAP-300, Ноутбук ASUS Лаборатория № 318 Учебная мебель, МФУ М Samsung лазерный SCX-4623F, Компьютер в составе: системный блок DEPO 460MDi5-650, монитор, клавиатура, мышь, Рефрактометр, набор ариометров, 2 рН-метра АНИОН-4100, 2 рН-метра HI98103 Checker1.	
---	--	--

Приложение № 1

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины Масс – спектрометрия. Хромато-масс-спектрометрия»
на 9 семестр

очная

форма обучения

Рабочую программу осуществляет:

Лекции: к.х.н., доцент Валинурова Э.Р.

Практические занятия: к.х.н., асс. Аллаярова Д.А.

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	6/216
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	36
практических/ семинарских	54
лабораторных	36
контроль самостоятельной работы (КСР)	-
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) ФКР	1.2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР) включая подготовку к экзамену/зачету	9
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	79,8

Форма(ы) контроля:
экзамен 9 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельно й работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Основные принципы и аппаратурное оформление хромато- масс-спектрометра, масс-анализаторы, интерфейсы, детекторы ионов.	3	4	6	7	1-3-основная; 1-3 -дополнительная	Подготовка	Опрос Лабораторная работа Тестовый контроль
2.	Предварительная обработка и оптимизация условий получения спектрограмм. Интерпретация масс- спектров.	3	5	3	7	1-3-основная; 1-3 -дополнительная	Подготовка	Опрос Контрольная работа Лабораторная работа
3.	Качественные теории масс-спектрометрии. Механизмы фрагментации органических соединений. Масс- спектральные правила.	3	5	3	7	1-3-основная; 1-3 - дополнительная	Подготовка	Опрос Лабораторная работа Тестовый контроль
4	Фрагментация органических	3	5	3	7	1-3-основная; 1-3 -	Подготовка	Опрос Контрольная работа

	соединений при электронно-ударной ионизации. Фрагментация углеводов.					дополнительная		Лабораторная работа
5	Распад при действии электронного удара гетероциклических соединений	3	5		7	1-3-основная; 1-3 дополнительная -	Подготовка	Опрос Контрольная работа Лабораторная работа
6	Распад галоген- и азотсодержащих органических соединений при ЭУ ионизации.	3	5		7	1-3-основная; 1-3 дополнительная -	Подготовка	Опрос Контрольная работа Лабораторная работа
7	Фрагментация кислородсодержащих органических соединений под действием электронного удара.	3	5	3	7	1-3-основная; 1-3 дополнительная -	Подготовка	Опрос Контрольная работа Лабораторная работа
8	Фрагментация серосодержащих органических соединений при электронно-ударной ионизации.	3	5	3	7	1-3-основная; 1-3 дополнительная -	Подготовка	Опрос Контрольная работа Лабораторная работа
9	Групповая идентификация органических соединений по массовым числам молекулярных и осколочных ионов.	3	5	6	7,8	1-3-основная; 1-3 дополнительная -	Подготовка	Опрос Контрольная работа Лабораторная работа

	Спектры ионных серий органических соединений.							
10	Хромато-масс-спектрометрическое определение следов органических соединений. ЭВМ для обработки масс-спектров. Виды поисковых, экспертных и интерпретирующих программ.	3	5	6	9	1-3-основная; 1-3 дополнительная -	Подготовка	Опрос Лабораторная работа Тестовый контроль
11	Количественный анализ в хромато-масс-спектрометрии. Химические методы в ХМС.	6	5	3	7	1-3-основная; 1-3 дополнительная -	Подготовка	Опрос Контрольная работа Лабораторная работа Тестовый контроль
...								
	Всего часов:							

