

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

Факультет физико-математических и естественных наук

Рекомендовано МССН
по направлению 04.00.00 «Химия»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины

МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Рекомендуется для направления подготовки

04.04.01 «ХИМИЯ»

Направленность программы (профиль)

«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»

1. Цели и задачи дисциплины.

Получение представлений об особенностях фрагментации различных классов органических соединений в условиях ионизации электронами, навыков получения и анализа совокупности спектральных характеристик органических соединений

2. Место дисциплины в структуре ОП ВО.

Дисциплина «Масс-спектрометрия органических соединений» относится к вариативной части блока 1 учебного плана по направлению 04.04.01 и является дисциплиной модуля 1 по выбору. Для успешного освоения дисциплины учащийся магистратуры обязан иметь базовые знания на уровне бакалавра. Владение навыками получения и интерпретации спектральных характеристик органических соединений необходимо для решения самого широкого круга современных научных и технических задач.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
Универсальные компетенции			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Методы органической химии Теоретическая органическая химия Методика работы с БД ЯМР органических соединений Домино реакции в синтезе гетероциклов Молекулярный спектральный анализ НИР Экспериментальные методы исследования в химии	Экспериментальные методы исследования в химии Преддипломная практика Актуальные задачи современной химии Химия гетероциклических соединений Стереохимия
Профессиональные компетенции			
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	Актуальные задачи современной химии Методы органической химии Теоретическая органическая химия Методика работы с БД ЯМР органических соединений Домино реакции в синтезе гетероциклов Молекулярный спектральный анализ НИР Экспериментальные методы исследования в химии	Экспериментальные методы исследования в химии Преддипломная практика Химия гетероциклических соединений Стереохимия
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Актуальные задачи современной химии Методы органической химии Теоретическая органическая химия	Экспериментальные методы исследования в химии Преддипломная практика Химия гетероциклических соединений

	Методика работы с БД ЯМР органических соединений Домино реакции в синтезе гетероциклов Молекулярный спектральный анализ НИР Экспериментальные методы исследования в химии	Стереохимия
--	---	-------------

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать: принципы фрагментации органических соединений в условиях ионизации электронами; основные механизмы разрыва связей и перегруппировочных процессов в условиях ионизации электронами; основные этапы интерпретации масс-спектров; основные направления фрагментации углеводородов, гетероциклических соединений, алифатических и ароматических аминов, алифатических и ароматических спиртов, алифатических и ароматических эфиров, алифатических и ароматических карбоновых кислот, алифатических и ароматических сложных эфиров алифатических и ароматических карбоновых кислот, образующиеся при этом характеристические ионы, основные типы нейтральных потерь.

Уметь: идентифицировать пик молекулярного иона; рассчитывать содержание галогенов по распределению интенсивностей изотопных пиков в мультиплете молекулярного иона; обнаруживать в масс-спектре основной набор характеристических ионов

и нейтральных потерь; на базе совокупности полученных при расшифровке данных интерпретировать масс-спектры органических соединений с отнесением основных ионов к соответствующим характеристичным направлениям фрагментации, относить соединение к соответствующему классу органических веществ, предлагать наиболее вероятную или вероятные структуры соединений; привлекать данные других физико-химических методов анализа для подтверждения выдвинутых предположений.

Владеть: навыками обработки масс-спектральных данных с определением основных характеристик анализируемого соединения на базе структуры мультиплетных пиков молекулярного иона, общего вида масс-спектра, характеристичных фрагментных ионов и нейтральных потерь, навыками обоснованного выбора наилучшего метода и способа изучения строения органического соединения.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет **3** зачетные единицы.

Вид учебной работы	Всего часов	Модули			
		5	6		
Аудиторные занятия (всего)	34	18	16		
В том числе:					
<i>Лекции</i>	18	18			
<i>Практические занятия (ПЗ)</i>					
<i>Семинары (С)</i>					
<i>Лабораторные работы (ЛР)</i>	16		16		
Самостоятельная работа (всего)	74	1	2		
Общая трудоемкость	час	108	36	72	
	зач. ед.	3	1	2	

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1.	Принципы фрагментации органических соединений в условиях ионизации электронами (ИЭ)	Основные методы ионизации и разделения ионов в масс-спектрометрии. Основные механизмы разрыва связей и расщепления органических соединений в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами, возможные перегруппировочные процессы. Основные масс-спектральные правила.
2.	Фрагментация углеводов в	Характерные особенности фрагментации алканов, алкенов, алкинов, циклоалканов, ароматических углеводов в

	условиях ИЭ	условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами.
3.	Фрагментация гетероциклических соединений в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации азот-, кислород-и серосодержащих алифатических и ароматических гетероциклических соединений в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами, орто-эффект.
4.	Фрагментация галогенпроизводных в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации галогенпроизводных в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами. Полиизотопные элементы и расчет их содержания.
5.	Фрагментация соединений с амино-группой в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации алифатических и ароматических аминов в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами. Использование дериватизации для изучения аминов с помощью ГХ/МС
6	Фрагментация соединений с гидроксильной группой в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации алифатических спиртов и фенолов, диалкиловых, алкил ариловых и диарилловых эфиров в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами. Аналогии между ионизацией электронами и tandemной масс-спектрометрией
7	Фрагментация соединений с карбоксильной группой в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации карбоновых кислот, алкиловых и ариловых сложных эфиров, производных фталевоы кислоты в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами.
8	Фрагментация соединений с несколькими функциональными группами в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации аминокислот и их производных в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами. Использование реагентов Хусека для анализа аминокислот и простейших пептидов методом ГХ/МС. Анализ окси- и оксо-кислот.

5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции	Практ. зан.	Лаб. зан.	Семинар	СРС	Всего час.
1.	Принципы фрагментации органических соединений в условиях ионизации электронами	3		3		12	18

	(ИЭ)						
2.	Фрагментация углеводов в условиях ИЭ	2		2		8	12
3.	Фрагментация гетероциклических соединений в условиях ИЭ	2		2		12	16
4.	Фрагментация галогенпроизводных в условиях ИЭ	2		2		10	14
5.	Фрагментация соединений с амино-группой в условиях ИЭ	2		1		4	7
6.	Фрагментация соединений с гидроксильной группой в условиях ИЭ	1		1		4	6
7.	Фрагментация соединений с карбоксильной группой в условиях ИЭ	4		3		16	23
8.	Фрагментация соединений с несколькими функциональными группами в условиях ИЭ	2		2		8	12
	Всего	18		16		74	108

6. Лабораторный практикум

На лабораторном практикуме подробно изучаются способы обработки и интерпретации масс-спектров.

* Темы лабораторных работ могут меняться в зависимости от тематики исследовательской работы магистра.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость (час.)
1.	1.	Принципы фрагментации органических соединений в условиях ионизации электронами (ИЭ)	3
2.	2.	Фрагментация углеводов в условиях ИЭ	2
3.	3.	Фрагментация гетероциклических соединений в условиях ИЭ	2
4.	4.	Фрагментация галогенпроизводных в условиях ИЭ	2
5.	5.	Фрагментация соединений с амино-группой в условиях ИЭ	1
6.	6.	Фрагментация соединений с гидроксильной группой в условиях ИЭ	1
7.	7.	Фрагментация соединений с карбоксильной группой в условиях ИЭ	3
8.	8.	Фрагментация соединений с несколькими функциональными группами в условиях ИЭ	2
	Всего		16

7. Практические занятия (семинары) – не предусмотрены учебным планом.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

ул. Орджоникидзе, д.3, корп. 1

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также для самостоятельной работы:

ауд.№ 612 Комплект специализированной мебели; технические средства: проектор BENQ MX661, проектор NEC NP40, экран моторизованный для проекторов, столы; имеется wi-fi

ул. Орджоникидзе, д.3, стр. 6

Лаборатория спектральных методов исследования ЦКП ФХИ

Учебно-научная лаборатория для проведения занятий лабораторного типа, индивидуальных консультаций

ауд.№ 119 Комплект специализированной мебели; специализированное оборудование химической лаборатории: ИК-фурье спектрометр BRUKER "MPA", хромато-масс-спектрометр FOCUS-DSQ с турбомолекулярным насосом 250л/с, газовый баллон (гелий), вытяжной шкаф, кондиционер, компьютер, имеется wi-fi

9. Информационное обеспечение дисциплины

а) программное обеспечение

Программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions № 86626883 (продлевается каждый год, при этом программе присваивается новый номер). ISIS Draw. Интернет поисковики FireFox и Opera, OMNIC 5735FB0C-6DFA-4240-BA3F-26BE4B3B3A86, Xcalibur 1.4 SR1.

б) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН
<http://lib.rudn.ru:8080/MegaPro/Web>
- База данных Scopus
<https://www.scopus.com/>
- База данных Web of Science
http://apps.webofknowledge.com/WOS_GeneralSearch_input.do?product=WOS&search_mode=GeneralSearch&SID=N1cZ3JYECIUJdm14VTK&preferencesSaved=
- Organic Chemistry Portal
<http://www.organic-chemistry.org/>
- База данных Reaxys
<https://www.reaxys.com/reaxys/secured/search.do>
- Электронная база
webbook.nist.gov
- Методические материалы на сайте ТУИС (рабочая программы курса, лекционные материалы, методическое обеспечение лабораторных занятий, материалы для подготовки к аттестационным испытаниям).

10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:

а) основная литература

1. Лебедев, А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии: учебное пособие / А.Т. Лебедев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Москва: Техносфера, 2015. - 704 с.: ил., табл., схем. - (Мир химии). - Библиогр.: с. 638 - 681. - ISBN 978-5-94836-409-4;
2. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе / 2. Н.Г. Ярышев, Ю.Н. Медведев, М.И. Токарев и др. - Издание второе,

переработанное и дополненное. - Москва: Прометей, 2015. - 196 с.: схем., ил., табл. - ISBN 978-5-9906134-6-1;

б) дополнительная литература

1. Лебедев, А.Т. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды / А.Т. Лебедев; пер. с англ. под ред. А.Т. Лебедева. - Москва: Техносфера, 2013. - 632 с.: ил., схем. - (Мир химии). - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-94836-363-9

11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Условия и критерии выставления оценок: от студентов требуется посещение лекций и лабораторных занятий, обязательное участие в аттестационно-тестовых испытаниях, выполнение заданий преподавателя. Для оценки текущих контрольных работ и итогового контроля применяется балльно-рейтинговая система оценки знаний.

Лекции:

Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; пометить важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Проверка терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь. Обозначить вопросы, термины, материал, который вызывает трудности, пометить и попытаться найти ответ в рекомендуемой литературе. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации.

Подготовка к промежуточной аттестации

При подготовке к итоговому контролю необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу.

Методические указания и рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Рекомендации к выполнению лабораторной работы № 1-8

Подготовка к работе:

- а) изучение теоретических основ работы по разделам учебника, указанным в описании;
- б) ознакомление с предстоящей работой по ее описанию и составление плана эксперимента;
- в) выписать из учебника или справочника значения количественных величин, которые понадобятся для расчетов;
- г) выписать в лабораторный журнал - форму лабораторного отчета, заполнив те разделы, которые могут быть заполнены до выполнения эксперимента;
- д) письменно ответить на контрольные вопросы.

Выполнение работы в лаборатории.

Внимательно изучить «специальные правила работы в химической лаборатории» и «Правила техники безопасности», вывешенные на лабораторном стенде (или имеющиеся в лаборатории) и неукоснительно их соблюдать:

- а) соблюдать чистоту и порядок на рабочем месте;
- б) перед началом работы проверьте по списку, приведенному в описании работы, наличие на вашем рабочем месте необходимого оборудования и реактивов; убедитесь в чистоте химической посуды, пипеток, кювет, шприцов и реактивов, прессформ при необходимости вымойте посуду;
- в) взяв с полки реагент и отобрав нужное количество, поставьте его на место; в конце работы приведите рабочее место в первоначальный порядок, расставив все по местам.

Правила работы студентов в лаборатории масс-спектрометрии.

- а) студенты допускаются к работе в лаборатории только после прохождения инструктажа по технике безопасности;
- б) нельзя заходить в помещение, где размещены масс-спектрометры, без преподавателя или лаборанта;
- в) включать и выключать масс-спектрометры, а также производить какие-либо манипуляции возле работающих приборов можно только в присутствии преподавателя или лаборанта;

г) при приготовлении образцов для анализа необходимо соблюдать правила работы и техники безопасности, принятые при работе с химическими реактивами в химических лабораториях: работать в халате, пользоваться резиновыми перчатками и при включенной вентиляции.

Правила оформления работы в лабораторном журнале.

1. Название работы.
2. Цель работы.
3. Краткое теоретическое введение (основные законы и формулы, уравнения или графики, относящиеся к теме лабораторной работы).
4. Экспериментальная часть:
 - список реактивов и оборудования;
 - схема прибора или установки;
 - конкретное задание на лабораторную работу;
 - условия проведения эксперимента (температура, концентрации растворов, длины волн и т.д.);
 - результаты измерений в виде таблиц и графиков;
 - расчёты по экспериментальным данным;
 - оценка погрешности измерений.
5. Выводы или заключение о результатах данной лабораторной работы.
6. Ответы на вопросы к защите лабораторной работы.

Примечание.

Все записи в тетради должны быть выполнены чернилами, графики – на миллиметровой бумаге только карандашом. Каждый график должен быть озаглавлен и вклеен в тетрадь.

Правила написания и оформления контрольных работ

- Контрольные работы выполняются в отдельной ученической тетради, на обложке которой указаны название дисциплины, фамилию и инициалы, специальность, курс. Перед каждой контрольной работой указывается номер контрольной работы, вариант задания, дата.
- Решение задачи должно сопровождаться составлением таблиц с отнесением полос поглощения в спектре к соответствующим группам соединения
- При выполнении тестовых работ студентам разрешается использование справочной литературы.

12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Масс-спектрометрия органических соединений» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

Разработчики:

доцент,
кафедры органической химии



Борисов Р. С.

Руководитель программы
профессор,
кафедры органической химии



Варламов А. В.

Заведующий кафедрой
органической химии



Воскресенский Л. Г.