

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор

подпись

« 31 »

мая

2019 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

***Б1.В.ДВ.01.02 МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ***

Направление подготовки/специальность 04.03.01 Химия

Направленность (профиль) - Неорганическая химия и химия
координационных соединений

Форма обучения - очная

Квалификация (степень) выпускника – бакалавр

Краснодар 2019

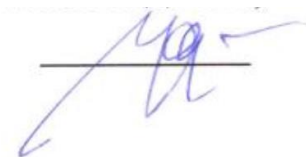
Рабочая программа дисциплины МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки - 04.03.01 Химия.

Программу составил А.И. Офлиди, доцент, канд. хим. наук



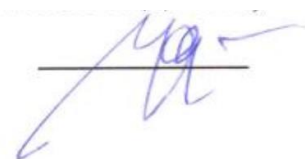
Рабочая программа дисциплины МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ утверждена на заседании кафедры (разработчика) общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии протокол № 13 от «14» 05 2019 г.

Заведующий кафедрой (разработчика) Буков Н.Н.



Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры (выпускающей) общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии протокол № 13 от «14» 05 2019 г.

Заведующий кафедрой (разработчика) Буков Н.Н.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий протокол № 6 от «16» 05 2019 г.

Председатель УМК факультета Стороженко Т.П.



Рецензенты:

Фролов В.Ю., директор ООО «Ланэс», канд. хим. наук

Шкирская С.А., доцент кафедры физической химии ФГБОУ ВО «КубГУ»

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель освоения дисциплины.

Целью курса является содействие формированию и развитию у студентов обще-профессиональных и профессиональных компетенций, позволяющих им в дальнейшем осуществлять профессиональную деятельность посредством освоения теоретических и экспериментальных основ химических, физико-химических и физических методов анализа различных объектов.

1.2 Задачи дисциплины.

– Создать чёткое представление о предмете масс-спектрометрии органических веществ, современном состоянии и путях развития масс-спектрометрии органических веществ, связи её с другими науками и практическом применении методов анализа в различных областях человеческой деятельности.

– Развить у студентов познавательную активность и способность творчески решать задачи, связанные с изучением структуры органических веществ методом масс-спектрометрии.

– Сформировать представления о возможности применения метода масс-спектрометрии.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Масс-спектрометрия неорганических соединений и координационных соединений» относится к дисциплинам по выбору Блока 1 "Дисциплины (модули)" учебного плана направления подготовки 04.03.01 «Химия».

Данный курс опирается на знания, полученные при изучении дисциплин: «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Химия координационных соединений».

Знания, приобретенные при освоении курса, могут быть использованы при решении различных задач по дисциплинам «Перспективные неорганические материалы со специальными функциями», «Химия твердого тела», а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

1.4 Требования к уровню освоения дисциплины

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся профессиональных компетенций:

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1	ПК-2	Способен применять современную аппаратуру при проведении научных исследований, а также обрабатывать и анализировать полученные результаты	применение метода масс-спектрометрии для анализа и идентификации неорганических и координационных соединений, способы пробоподготовки для анализа методом масс-спектрометрии, основные принципы расшифровки масс-спектров	расшифровывать масс-спектры, проводить пробоподготовку образцов для анализа методом масс-спектрометрии, оценивать возможности применения данного метода для анализа различных неорганических и координационных соединений.	основными методами получения и исследования химических веществ и реакций, навыками проведения химического эксперимента для решения профессиональных задач
2	ПК-3	Способен использовать современные теоретические представления химической науки для анализа экспериментальных данных	основные программы, позволяющие обрабатывать масс-спектры, наиболее крупные базы данных по масс-спектрам.	использовать базы данных по масс-спектрам неорганических и координационных соединений	методами обработки результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зач.ед. (108 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице (для студентов ОФО).

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры (часы)			
			5			
Контактная работа, в том числе:		52,2	52,2			
Аудиторные занятия (всего):		50	50			
Занятия лекционного типа		16	16		-	-
Лабораторные занятия		34	34		-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		-	-		-	-
		-	-		-	-
Иная контактная работа:						
Контроль самостоятельной работы (КСР)		2	2			
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2	0,2			
Самостоятельная работа, в том числе:		55,8	55,8			
<i>Курсовая работа</i>		-	-		-	-
<i>Проработка учебного (теоретического) материала</i>		28	28		-	-
<i>Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)</i>		-	-		-	-
<i>Реферат</i>		-	-		-	-
Подготовка к текущему контролю		27,8	27,8		-	-
Контроль:						
Подготовка к экзамену						
Общая трудоемкость	час.	108	108		-	-
	в том числе контактная работа	52,2	52,2			
	зач. ед	3	3			

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы (темы) дисциплины, изучаемые в 5 семестре (очная форма)

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1	2	3	4	5	6	7
1.	Общие понятия и основные определения масс-спектрометрии	25,8	4	-	6	15,8
2.	Масс-спектрометрические методы анализа	40	6	-	14	20
3.	Методы ионизации веществ в молекулярном анализе	40	6	-	14	20
	<i>Итого по дисциплине:</i>	105,8	16	-	34	55,8
	Контроль самостоятельной работы (КСР)	2				
	Промежуточная аттестация (ИКР)	0,2				
	Подготовка к текущему контролю	-				
	Общая трудоемкость по дисциплине	108				

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

2.3.1 Занятия лекционного типа

№	Наименование раздела (темы)	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Общие понятия и основные определения масс-спектрометрии	Исторический обзор. Блок-схема масс-спектрометра. Основные принципы метода масс-спектрометрии. Системы ввода пробы в масс-спектрометр. Основные задачи масс-спектрометрии в аналитике и биофизике. Обработка результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий.	Устный опрос
2.	Масс-спектрометрические методы анализа	Общие представления о масс-спектрометрическом методе анализа. Аналитическая характеристика метода. Способы ионизации и их аналитическое использование. Принцип работы и схема масс-спектрометра с магнитным масс-анализатором. Применение масс-спектрометрии для анализа. Определение примесей в твердых веществах методом искровой масс-спектрометрии.	Устный опрос
3.	Методы ионизации веществ в	Методы ионизации газов и летучих жидкостей. Электронная ионизация	Устный опрос

№	Наименование раздела (темы)	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
	молекулярном анализе	веществ в газовой фазе. Химическая ионизация в ионно-молекулярных реакциях. Ионизация при атмосферном давлении. Методы ионизации нелетучих веществ. Полевая десорбция. Плазменная десорбция. Спрей-методы. Электроспрей. Газодинамические интерфейсы спрей-методов. Матрично-десорбционные методы анализа. ВИМС и МАЛДИ.	

2.3.2 Занятия семинарского типа

Занятия семинарского типа – не предусмотрены

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Масс-спектрометрические методы анализа	Установление структуры вещества по масс-спектру с использованием баз данных Изучение процессов фрагментации	Отчет по лабораторной работе, устный опрос
2.	Методы ионизации веществ в молекулярном анализе	Анализ смеси веществ методом хроматомасс-спектрометрии	Отчет по лабораторной работе, устный опрос

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовые работы (проекты) – не предусмотрены

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1	Проработка учебного (теоретического) материала	1. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.И. Васильева [и др.]. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 416 с. — ISBN: 978-5-8114-1638-7. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/50168 . 2. Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов:

		методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с.
2.	Подготовка к текущему контролю	1. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.И. Васильева [и др.]. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 416 с. — ISBN: 978-5-8114-1638-7. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/50168 . 2. Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с.

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии

В соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению «Химия» реализация компетентностного подхода предусматривает широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий. Интерактивное обучение - путь к управлению системы самостоятельной работы студентов.

Технология интерактивного обучения заключается в том, что на протяжении всего учебного времени происходит обмен мнениями, выслушиваются и обсуждаются разные точки зрения студентов. Интерактивные методы - это способы целенаправленного усиленного взаимодействия преподаватели и студентов по созданию оптимальных условий процесса обучения.

Организация изучения материала курса осуществляется на основе системно-деятельностного подхода и рекомендаций поэтапного формирования умственных действий. При освоении дисциплины используются как традиционные, так и новые педагогические технологии. Лекции и лабораторные занятия являются традиционными при обучении в вузах и способствуют формированию у студентов базовых знаний, основных мыслительных операций, развитию логики. Лекции носят мотивационно-познавательный характер. Лабораторные занятия являются самостоятельными и имеют проблемно-поисковый характер. Лабораторную работу, выполняемую студентом, можно считать проблемной ситуацией и ее решение позволяет реализовать творческую деятельность, развить

коммуникативную способность каждого студента, научить его аргументированно выражать свои мысли в присутствии других, развивать навыки экспериментальной работы.

Для повышения эффективности учебного процесса используются следующие образовательные технологии: информационно-развивающие технологии, направленные на формирование системы знаний, запоминание и свободное оперирование ими. Используется метод проблемного изложения материала, самостоятельное изучение литературы, применение новых информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний включая использование технических и электронных средств информации; деятельностные практико-ориентированные технологии, направленные на формирование системы профессиональных практических умений при проведении экспериментальных исследований, обеспечивающих возможность качественно выполнять профессиональную деятельность; развивающие проблемно-ориентированные технологии, направленные на формирование и развитие проблемного мышления, мыслительной активности, способности видеть и формулировать проблемы, выбирать способы и средства для их решения; технологии личностно-ориентированного обучения, позволяющие создавать индивидуальные образовательные технологии, обеспечивающие учет различных способностей обучающихся, создание необходимых условий для развития их индивидуальных особенностей.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья могут быть использованы образовательные технологии, позволяющие полностью индивидуализировать содержание, методы и темпы учебной деятельности, вносить вовремя необходимые коррективы как в деятельность студента-инвалида, так и в деятельность преподавателя.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

4.1 Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Фонд оценочных средств включает контрольные материалы для проведения **текущего контроля** в форме устного опроса и отчетов по лабораторным работам и **промежуточной аттестации** в форме вопросов к зачету.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

- при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

- при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

- при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к

ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

Структура оценочных средств для текущей и промежуточной аттестации

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины*	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства	
			Текущий контроль	Промежуточная аттестация
1	Общие понятия и основные определения масс- спектрометрии	ПК-2, ПК-3	Устный опрос	Вопрос на зачете 1-4
2	Масс- спектрометрические методы анализа	ПК-2, ПК-3	Устный опрос, отчет по лабораторной работе № 1, 2.	Вопрос на зачете 5-10
3	Методы ионизации веществ в молекулярном анализе	ПК-2, ПК-3	Устный опрос, отчет по лабораторной работе № 3.	Вопрос на зачете 11-21

Код и наименование компетенций	Соответствие уровней освоения компетенции планируемым результатам обучения и критериям их оценивания		
	пороговый	базовый	продвинутый
	Оценка		
	Удовлетворительно /зачтено	Хорошо/зачтено	Отлично /зачтено
ПК-2 – владением базовыми навыками использования	Знает: – применение метода масс- спектрометрии для	Знает: – применение метода масс- спектрометрии для	Знает: – применение метода масс- спектрометрии для

современной аппаратуры при проведении научных исследований	анализа и идентификации неорганических и координационных соединений, – способы пробоподготовки для анализа методом масс-спектрометрии, – основные принципы расшифровки масс-спектров.	анализа и идентификации неорганических и координационных соединений, – способы пробоподготовки для анализа методом масс-спектрометрии, – основные и специальные принципы расшифровки масс-спектров.	анализа и идентификации неорганических и координационных соединений, – способы пробоподготовки для анализа методом масс-спектрометрии, – основные и специальные принципы расшифровки масс-спектров.
	Умеет: – расшифровывать масс-спектры, – проводить пробоподготовку образцов для анализа методом масс-спектрометрии, – оценивать возможности применения данного метода для анализа различных неорганических и координационных соединений. .	Умеет: – расшифровывать масс-спектры, – проводить пробоподготовку образцов для анализа методом масс-спектрометрии, – оценивать и различать возможности применения данного метода для анализа различных неорганических и координационных соединений.	Умеет: – расшифровывать масс-спектры, – проводить пробоподготовку образцов для анализа методом масс-спектрометрии, – оценивать и различать возможности применения данного метода для анализа различных неорганических и координационных соединений.
	Владеет: – основными методами получения и исследования химических веществ и реакций, – навыками проведения	Владеет: – основными методами получения и исследования химических веществ и реакций, – навыками	Владеет: – основными методами получения и исследования химических веществ и реакций, – навыками

	химического эксперимента.	проведения химического эксперимента..	проведения химического эксперимента..
ПК-3 – способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	Знает: – основные программы, позволяющие обрабатывать масс-спектры, – наиболее крупные базы данных по масс-спектрам.	Знает: – основные программы, позволяющие обрабатывать масс-спектры, – наиболее крупные базы данных по масс-спектрам, – крупные реферативные базы.	Знает: – основные программы, позволяющие обрабатывать масс-спектры, – наиболее крупные базы данных по масс-спектрам, – крупные реферативные базы.
	Умеет: – использовать базы данных по масс-спектрам неорганических и координационных соединений.	Умеет: – использовать базы данных по масс-спектрам неорганических и координационных соединений.	Умеет: – использовать базы данных по масс-спектрам неорганических и координационных соединений, – кратко и содержательно излагать результаты исследований.
	Владеет: – методами обработки результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий.	Владеет: – методами обработки результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий.	Владеет: – методами обработки результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий.

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:

Устный опрос

Компетенции проверяемые оценочным средством: ПК-2, ПК-3

Вариант 1

1. Метод масс-спектрометрии основан на ...
 - а) регистрации ионов, возникающих при возбуждении электронов;
 - б) регистрации ионов, возникающих при поглощении веществом электромагнитного излучения;
 - в) регистрации ионов, возникающих при магнитных колебаниях атомного ядра;
 - г) регистрации ионов, возникающих при ионизации нейтральных молекул.
2. Что происходит при бомбардировке электронами с высокой энергией паров вещества при давлении 10^{-5} – 10^{-8} мм рт.ст.?
 - а) ионизация;
 - б) протонизация;
 - в) циклизация;
 - г) полимеризация.
3. Молекулярным ионом называют ...
 - а) возбужденный катион, образующийся в результате диссоциации;
 - б) возбужденный анион-радикал, образующийся при принятии молекулой электрона под воздействием внешней энергии;
 - в) возбужденный ион, расположенный в магнитном поле;
 - г) возбужденный катион-радикал, образующийся при потере молекулой электрона под воздействием электронного удара.

Вариант 2

1. В чем заключается преимущество масс-спектрометрии?
 - а) специфичность и низкий предел обнаружения;
 - б) быстрота и точность определения структуры вещества;
 - в) простота проведения анализа;
 - г) высокая информативность по сравнению с другими методами.
2. В чем суть «азотного правила»?
 - а) молекула с нечетной молекулярной массой содержит атом азота, либо содержит нечетное число атомов азота;
 - б) молекула с четной молекулярной массой либо содержит атом азота, либо содержит четное число атомов азота;

- г) молекула с четной молекулярной массой либо не содержит атом азота, либо содержит нечетное число атомов азота;
д) молекула с четной молекулярной массой либо не содержит атом азота, либо содержит четное число атомов азота.

3. «Четно-электронное» правило заключается в следующем ...

- а) ион-радикалы (нечетное количество электронов) или радикалы, или четно-электронные нейтральные молекулы могут элиминировать, тогда как ионы (четное число электронов) могут терять лишь нейтральные четно-электронные частицы, но не радикалы;
б) катион-радикалы (нечетное количество электронов) или радикалы, или четно-электронные нейтральные молекулы могут элиминировать, тогда как ионы (четное число электронов) могут терять лишь положительно заряженные электронные частицы;
в) анион-радикалы (нечетное количество электронов) или четно-электронные нейтральные молекулы могут элиминировать, тогда как ионы могут терять лишь нейтральные четно-электронные частицы, но не радикалы;
г) катион-радикалы или радикалы, или четно-электронные нейтральные молекулы могут элиминировать, тогда как ионы (четное число электронов) могут терять лишь нейтральные четно-электронные частицы, но не радикалы.

Вариант 3

1. Определите формулу вещества по масс-спектру, если его брутто-формула C_4H_8O .

- а) бензойная кислота;
б) бутанон;
в) бутанол;
г) бутаналь.

2. В чем заключается перегруппировка Мак-Лафферти?

- а) миграция атома водорода через четырехчленное переходное состояние, сопровождающаяся выделением нейтральной молекулы;
б) миграция атома водорода через шестичленное переходное состояние, сопровождающаяся выделением нейтральной молекулы;
в) выброс нейтральной молекулы при участии атомов водорода из различных положений;
г) миграция атома водорода через шестичленное переходное состояние, сопровождающаяся выделением нейтральной молекулы.

3. Определите элементный состав соединения, исходя из интенсивностей изотопных пиков молекулярного иона: 108 (100 %), 109 (7,85 %) и 110 (0,45 %).

- а) $C_7H_6O_2$;
б) C_6H_{12} ;
в) C_4H_4N ;

г) C_7H_8O .

Вариант 4

1. Определите формулу вещества, спектр которого содержит следующие значения m/z : 46, 45, 31, 29, 15.

- а) этанол;
- б) пропаналь;
- в) изопропил;
- г) метилсалицилат.

2. О чем можно судить по интенсивности пиков масс- спектров?

- а) о химическом состоянии изучаемых атомов;
- б) о количестве атомов данного элемента;
- в) о химических свойствах изучаемых атомов;
- г) о структуре вещества.

Критерии оценки:

Критерии	Оценка	Уровень
Правильно решены все три задания (в решениях/ответах может присутствовать небольшое число неточностей, не носящих принципиального характера).	«отлично»	повышенный (продвинутый) уровень
Одно из трех заданий выполнено правильно не менее, чем на 70 %, из остальных двух заданий правильно решены либо все, либо одно (в решениях может присутствовать небольшое число неточностей, не носящих принципиального характера).	«хорошо»	базовый уровень
Одно из трех заданий выполнено правильно не менее, чем на 50 %, но не более 70%, из остальных двух заданий правильно решено одно (в решениях может присутствовать небольшое число неточностей, не носящих принципиального характера).	«удовлетворительно»	пороговый уровень
Правильно решена одна задач, остальные полностью не решены, либо не решена ни одна.	«неудовлетворительно»	менее 50%, уровень не сформирован

Отчеты по лабораторным работам

Компетенции проверяемые оценочным средством: ПК-2, ПК-3

Лабораторная работа №3

Анализ смеси органических веществ методом хроматомасс-спектрометрии

Цель: изучение комбинированного tandemного квадрупольно-времяпролетного масс-спектрометра QStar Elite (MDS Sciex Applied Biosystems, Канада) и определение состава жидкой смеси.

ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ Комбинированный tandemный квадрупольно-времяпролетный масс спектрометр (QqTOF), предназначен для решения широкого круга исследовательских и прикладных задач. Применение в одном приборе двух масс-анализаторов и расположенной между ними ячейки столкновений позволяет проводить фрагментацию и последующий масс спектрометрический анализ предварительно отобранных родительских ионов пробы, тем самым существенно повышая достоверность определения структуры молекул пробы. Возможность применения различных источников ионов позволяет использовать прибор для анализа как жидких, так и газовых смесей. Метод tandemной масс-спектрометрии может быть использован для самых разнообразных приложений – от структурного анализа небольших молекул до качественного и количественного анализа протеинов и пептидов. Потоки элюента от 2 нл/мин до 2 мл/мин (в зависимости от источника ионов) позволяют совмещать прибор с различными системами для разделения сложных смесей – от электрофореза и нано ВЭЖХ до высокоскоростной ВЭЖХ. Прибор может быть совмещен со спектрометром ионной подвижности.

Система ввода пробы Для ввода образца в приборе предусмотрены следующие устройства: 1. Стандартный интегрированный шприцевой насос для работы с потоками от 10 нл/мин до 10 мл/мин. Величину потока определяют условиями ввода. 2. 10-портовый 2-позиционный вентиль.

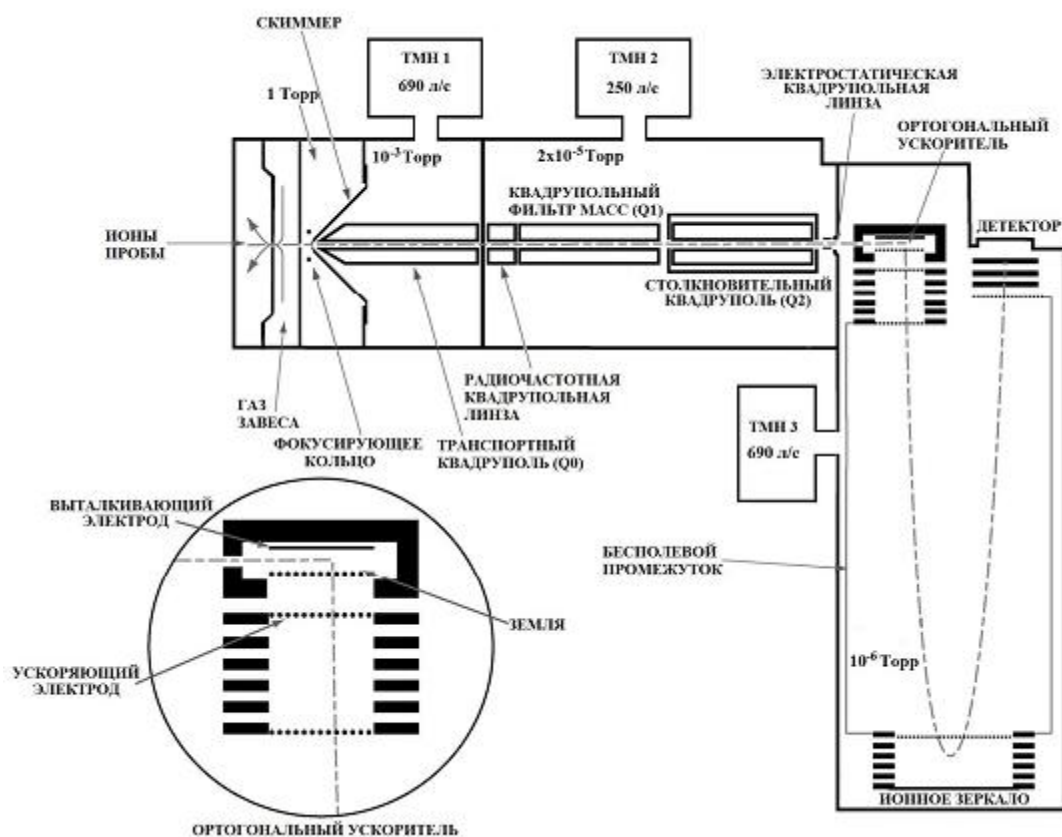


Рис. 1. – Принципиальная схема аналитической части тандемного квадрупольно-времяпролетного масс-спектрометра QStar Elite.

Источник ионов в комбинированном тандемном квадрупольно-времяпролётном масс-спектрометре принципиально предусмотрена возможность применения следующих методов ионизации пробы: - химическая ионизация при атмосферном давлении (APCI), - фотоионизация при атмосферном давлении (APPI), (рис. 1), - стимулированная матрицей лазерная десорбция (MALDI).

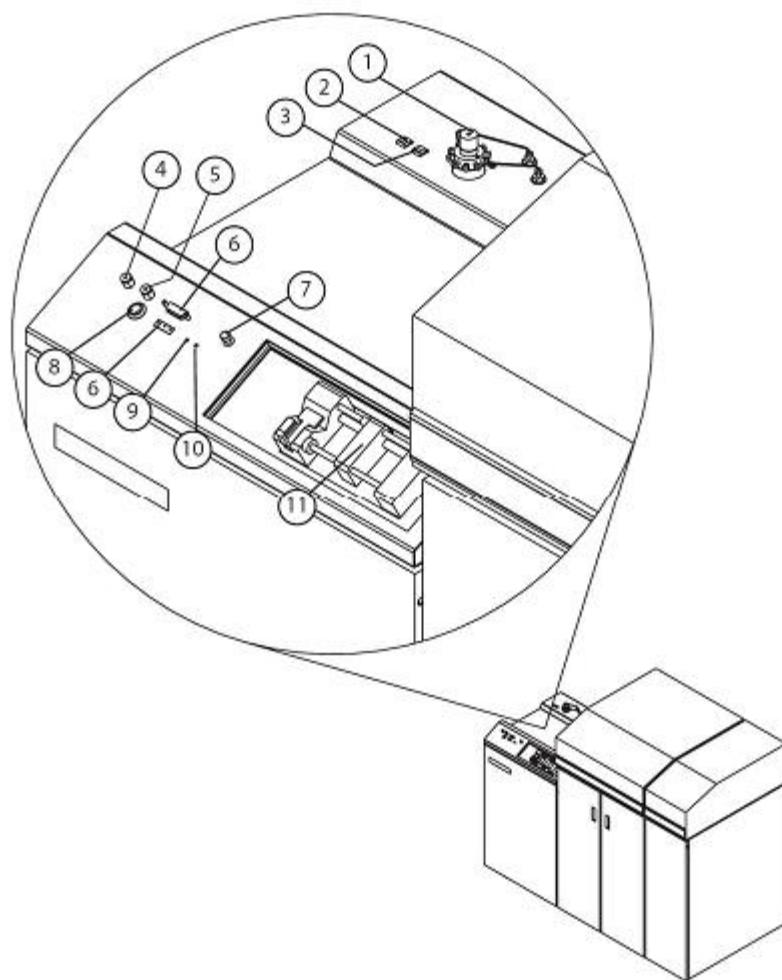


Рис. 2 – Панель источника ионов tandemного квадрупольно-времяпролетного масс-спектрометра QStar Elite.

Источник электрораспыления преобразует ионы из жидкой фазы в газовую фазу. Образцы вводятся через распылитель с высоким напряжением, вызывая распыление небольшого количества заряженных частиц. В ионном источнике ионы переходят в газовую фазу с поверхностного слоя дробящихся капель посредством процесса, названного «ионное испарение» (рис. 2). Комбинированный tandemный квадрупольно-времяпролётный масс-спектрометр оснащен источником ионов с электрораспылением с дополнительным горячим потоком осушенного газа (4000 °C) ортогонально к струе заряженных капель из электрораспылителя для повышения скорости испарения растворителя пробы в случае больших потоков. Источник ионов с электрораспылением позволяет непосредственно наблюдать ввод через стеклянное окошко, и снабжен удобным доступом к вакуумному интерфейсу. Источник включает следующие внешние соединения (рис. 2):

- девятипозиционный клапан маршрутизатор,
- кнопка загрузки, - кнопка слива,
- соединение для газа испарителя (Gas1),
- соединение для газа нагревателя (Gas2),
- разъем контроллера нагрева источника TurboIonSpray®,

- соединение для выхлопа,
- разъём подводки напряжения к источнику ионов,
- индикаторная лампочка (вакуум),
- аварийная индикаторная лампочка,
- шприцевой насос.

Интерфейс дифференциальной откачки.

Интерфейс дифференциальной откачки включает пластину газовой завесы, пластину ввода и скиммер (конус с отверстием). Между пластиной газовой завесы и пластиной ввода подается газ завесы – высокочистый (99,999%) азот. Поток газа завесы делится между потоком в вакуум через пластину ввода и потоком в источник, препятствующим попаданию нейтральных частиц в интерфейс. Система газовой завесы эффективно производит отсев нейтральных частиц и обеспечивает попадание в масс-спектрометр только ионов. Область между пластиной ввода и скиммером откачивается пластинчато-роторным насосом до давления 1 – 2 Торр. Потенциалы на пластинах и конусе оптимизируются таким образом, чтобы повысить эффективность прохождения ионов через бб интерфейс и подобрать оптимальные для данного анализа условия столкновения ионов с молекулами остаточного газа. Перенос ионов из области ионизации в квадрупольный анализатор осуществляется с помощью дополнительного транспортного квадруполя Q0, играющего роль ионпровода. Транспортный квадруполь всегда работает в радиочастотном режиме - режиме постоянного пропускания ионов всех масс. Транспортировка ионов через радиочастотный квадруполь производится при повышенном давлении для более эффективной фокусировки ионного пучка. Отсутствие нагревательных элементов и капилляров обеспечивают возможность анализа даже неустойчивых комплексов. Область, в которой располагается транспортный радиочастотный квадруполь, откачивается отдельным турбомолекулярным насосом и находится при давлении 10-3 Торр. Транспортный квадруполь Q0 фокусирует и переносит ионы из вакуумного интерфейса в область радиочастотной квадрупольной линзы и в область высокого вакуума ($2 \cdot 10^{-5}$ – $5 \cdot 10^{-6}$ Торр) квадрупольного фильтра масс Q1. Для того чтобы оптимизировать трансмиссию ионов, как Q0, так и радиочастотная квадрупольная линза, электрически связана с Q1 радиочастотным напряжением. Радиочастотное напряжение, приложенное к Q0 и квадрупольным линзам, это постоянная часть радиочастотного напряжения, приложенного к Q1.

Квадрупольный фильтр масс.

Квадрупольный фильтр масс представляет собой четыре цилиндрических электрода, установленные на керамической втулке, окружающей ионный пучок. В режиме времяпролетного анализатора (TOF) квадрупольный фильтр масс работает в радиочастотном режиме – режиме постоянного пропускания ионов в широком диапазоне масс. В режиме тандемной масс-спектрометрии (MS/MS) квадруполь Q1 работает как фильтр масс благодаря приложению постоянного напряжения. В режиме фильтрации масс квадрупольный масс-

спектрометр охватывает диапазон масс 5 – 6 000 а.е.м. с 67 разрешением на полувысоте 0,3 – 0,1 а.е.м. по всему диапазону масс. Область квадрупольного фильтра масс откачивается турбомолекулярным насосом до давления ($2 \cdot 10^{-5}$ – $5 \cdot 10^{-6}$ Торр).

Столкновительная ячейка.

Столкновительная ячейка предназначена для контролируемой диссоциации родительских ионов массы, выбранной квадрупольным фильтром. Получаемые в результате такой диссоциации дочерние ионы затем анализируются времяпролетным масс-анализатором. На основании результатов анализа делается заключение о структуре родительского иона или ионов. Внутри столкновительной ячейки располагается квадруполь Q2, который пространственно располагается между квадрупольным фильтром масс Q1 и времяпролетным масс-анализатором. Квадруполь Q2 осуществляет транспортировку ионов через столкновительную ячейку во времяпролетный масс-анализатор. Квадруполь Q2 постоянно работает в радиочастотном режиме. Обычно радиочастотное напряжение перешагивает два или три диапазона в течение сканирования для того чтобы пропустить более широкий диапазон масс. Столкновительная ячейка ограничена керамическим корпусом. В режиме тандемной масс-спектрометрии давление в ячейке повышается вследствие подачи столкновительного газа - высокочистого (99.999%) азота либо аргона. Поток газа контролируется программно. Внутри корпуса находится квадруполь Q1, ограниченный с каждой из сторон промежуточными линзами.

Времяпролетный масс-анализатор.

В масс-спектрометре используется времяпролетный масс-анализатор типа масс-рефлектор с ортогональным вводом. Ионы из ячейки столкновений через узкую щель попадают в ортогональный ускоритель, заполняют его и, после приложения выталкивающего импульса ускоряются перпендикулярно первоначальному движению в направлении ионного зеркала. После отражения в ионном зеркале ионы ускоряются в направлении детектора. За время движения во времяпролетном масс-анализаторе ионы разделяются по времени пролета. Ортогональный ускоритель позволяет минимизировать исходный разброс ионов по компоненте скоростей в направлении времяпролетного разделения. Ионное зеркало позволяет компенсировать начальный разброс по координате старта в направлении времяпролетного разделения. Как результат – масс-анализатор делает возможным достижение высокой разрешающей способности. Времяпролетный масс-спектрометр охватывает диапазон масс 5 – 40 000 а.е.м. с разрешающей способностью на полувысоте 15 000 по m/z 956. Точность определения массы с внутренним стандартом составляет менее $2 \cdot 10^{-6}$. Точность определения массы без внутреннего стандарта составляет менее $5 \cdot 10^{-6}$. Частота сбора данных составляет до 20 спектров/с при скорости работы детектора 7,6 ГГц. Линейный динамический диапазон составляет $1 \cdot 10^4$ импульсов/с. Область времяпролетного масс-спектрометра откачивается турбомолекулярным насосом до давления ($1 \cdot 10^{-6}$ – $7 \cdot 10^{-7}$ Торр).

Детектор.

Масс-спектрометр оснащен вторично-электронным умножителем на основе сборки микроканальных пластин с коэффициентом умножения 10^6 . Анод умножителя разделен на четыре независимых сегмента. Каждый сегмент соединен с собственным предусилителем и дискриминатором. Детектор конвертирует каждый электронный импульс в импульс напряжения порядка 100 мВ для каждого иона.

Система регистрации.

В приборе применяется система регистрации на основе многоканального временного анализатора (TDC – преобразователь время-код). Такая система осуществляет синхронизованный с выталкивающим импульсом ортогонального акселератора счет 69 ионов по мере достижения ими детектора. При регистрации события поступления иона на детектор такая система записывает время пролета иона – временной интервал между стартом иона (выталкивающим импульсом) и событием поступления иона на детектор. Многоканальный временной анализатор имеет 8 независимых каналов записи времен пролета. Одновременно может быть записано не более 4-х событий поступления ионов на детектор. Временное разрешение составляет 132 пс.

Вакуумная система.

Вакуумная система масс-спектрометра QStar Elite включает один пластинчато-роторный насос и три турбомолекулярных насоса из которых насос 690 л/с откачивает область транспортного квадруполя, насос 250 л/с откачивает область квадрупольного фильтра масс и насос 690 л/с откачивает область времяпролетного масс-анализатора.

РАБОТА С КВАДРУПОЛЬНО-ВРЕМЯПРОЛЕТНЫМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРОМ QSTAR ELITE.

Конструктивно масс-спектрометр состоит из аналитической стойки, отдельно стоящего насоса предварительной откачки, генератора азота, компьютера. В аналитической стойке (рис. 3.3) находятся камера анализатора (с расположенными в ней источником ионов, интерфейсом дифференциальной откачки, квадрупольным анализатором, столкновительной ячейкой, времяпролетным анализатором и детектором), элементы вакуумной системы и блоки их питания: три турбомолекулярных насоса; общий выключатель питания, выключатель питания стойки и высоковакуумной системы; вакуумметр; блоки питания элементов аналитической части и система управления и сбора данных. 70 Отдельно стоящий насос форвакуумной откачки включается общим выключателем питания. Генератор азота включается сетевым выключателем на лицевой панели. Модуль бесперебойного питания обеспечивает защиту от кратковременного падения напряжения.

Подготовка масс-спектрометра к измерениям.

1. Включить генератор азота.
2. Включить общий выключатель питания на задней панели аналитической стойки масс-спектрометра QStar Elite. При этом должен включиться отдельно расположенный пластинчато- роторный насос.

3. Через 10 мин после включения пластинчато-роторного насоса включить выключатель аналитической стойки. После этого с небольшой задержкой должны включиться турбомолекулярные насосы. Лампочка «Status» должна начать мигать зеленым светом.

4. Дождаться, когда давление в камере анализатора окажется ниже $1 \cdot 10^{-6}$ мм. рт. ст. При этом лампочка «Status» должна перестать мигать и постоянно гореть зеленым светом.

5. Включить компьютер и запустить программу «QSAlyst 2.0».

6. Выбрать пункт меню «Hardware configuration» и активировать профиль нажатием клавиши «Activate profile». После успешной активации в правом нижнем углу экрана должен загореться зеленый индикатор.

7. Для работы выбрать опцию «Manual turning».

8. В двух доступных методах управления – управления шприцевым насосом и масс-спектрометром установить необходимые параметры эксперимента.

Проведение измерений.

1. Набрать пробу в шприц.

2. Подключить шприц к каналу подачи пробы.

3. Установить шприц в шприцевой насос.

4. В окне управления шприцевым насосом запустить шприцевой насос.

5. В окне управления масс-спектрометром нажать кнопку Start.

6. После завершения измерений выключить шприцевой насос.

Выключение масс-спектрометра.

После завершения анализа достаточно деактивировать профиль. При этом прибор переводится в спящий режим. Полное выключение прибора необходимо только в случае выполнения сервисных работ. Полное выключение прибора выполняется при деактивированном профиле в следующем порядке.

1. Открыть верхнюю крышку аналитической стойки и выключить выключатель аналитической стойки (перевести верхнюю кнопку в среднее положение). Лампочка «Status» должна погаснуть.

2. Через 5 мин выключить общий выключатель питания аналитической стойки. Форвакуумный насос должен выключиться. Через 15 мин давление внутри вакуумной системы должно быть равно атмосферному давлению.

3. Через 15 мин после выключения форвакуумного насоса можно выключить генератор азота.

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ И ЗАДАНИЕ ДЛЯ ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ.

Исходные данные. В качестве исследуемой пробы выбирается раствор спирта. Анализ проводится на квадрупольно- времяпролетном масс-спектрометре QStar Elite. Задание. Ознакомиться с принципом действия квадрупольно- времяпролетного масс-спектрометра. Измерить массовый состав жидкой смеси, идентифицировать линии массового спектра.

ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ.

1. Включить и подготовить масс-спектрометр к измерениям.

2. Настроить масс-спектрометр на оптимальный режим измерения.

3. Записать массовый спектр (не менее 10 раз).

4. Статистически обработать результаты измерений и идентифицировать компоненты смеси.

5. Рассчитать разрешающую способность масс-спектрометра по основным пикам масс спектра.

6. После выполнения работы перевести прибор в спящий режим, деактивировав профиль.

В отчете о лабораторной работе должно быть приведено следующее: - структурная схема масс-спектрометра и описание назначения ее элементов; - полученные массовые спектры; - расчет разрешающей способности (по масс-спектру) для низких и высоких значений масс ионов; - результаты идентификации массовых линий; - результаты статистической обработки состава исследуемой смеси. Все цифровые результаты должны быть оформлены в виде таблиц.

Вопросы к лабораторной работе.

1. Объяснить принцип работы квадрупольного и времяпролетного масс-спектрометров.

2. Перечислить факторы, влияющие на разрешающую способность и чувствительность квадрупольного и времяпролетного масс-спектрометров.

3. Назвать достоинства и недостатки квадрупольного и времяпролетного масс-спектрометров.

4. Каковы источники фона квадрупольного и времяпролетного масс-спектрометров?

5. Объяснить устройство вакуумной системы прибора.

Критерии оценки:

Критерии	Оценка	Уровень
Студент самостоятельно или в составе малой группы выполнил лабораторную работу, предусмотренную учебным планом, а также дает ответы на вопросы по этой работе при ее защите преподавателю.	«зачтено»	пороговый уровень
Студент не выполнил лабораторную работу, либо не способен ответить на вопросы при ее защите.	«не зачтено»	уровень не сформирован

**Зачетно-экзаменационные материалы
для промежуточной аттестации (экзамен/зачет)**

**Вопросы для подготовки к зачету
Компетенции проверяемые оценочным средством: ПК-2, ПК-3**

1. Блок-схема масс-спектрометра.
2. Основные принципы метода масс-спектрометрии.
3. Системы ввода пробы в масс-спектрометр.
4. Основные задачи масс-спектрометрии в аналитике и биофизике
5. . Общие представления о масс-спектрометрическом методе анализа.
6. Аналитическая характеристика метода масс-спектрометрии.
7. Способы ионизации и их аналитическое использование.
8. Принцип работы и схема масс-спектрометра с магнитным масс-анализатором.
9. Применение масс-спектрометрии для анализа органических соединений и элементного и изотопного анализа.
10. Определение примесей в твердых веществах методом искровой масс-спектрометрии.
11. Методы ионизации газов и летучих жидкостей.
12. Электронная ионизация веществ в газовой фазе.
13. Химическая ионизация в ионно-молекулярных реакциях.
14. Ионизация при атмосферном давлении.
15. Методы ионизации нелетучих веществ.
16. Полевая десорбция.
17. Плазменная десорбция.
18. Спрей-методы ионизации.
19. Электроспрей-методы ионизации.
20. Газодинамические интерфейсы спрей-методов.
21. Матрично-десорбционные методы анализа биоорганических веществ.

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

Методические рекомендации к сдаче зачета

Студенты обязаны сдать зачет в соответствии с расписанием и учебным планом. Зачет является формой контроля усвоения студентом учебной программы по дисциплине, выполнения лабораторных работ.

Результат сдачи зачета по прослушанному курсу должны оцениваться как итог деятельности студента в семестре, а именно - по посещаемости лекций, результатам работы на лабораторных занятиях, выполнения самостоятельной работы. При этом допускается на очной форме обучения пропуск не более 20%

занятий, с обязательной отработкой пропущенных лабораторных работ. Студенты у которых количество пропусков превышает установленную норму, не выполнившие все виды работ и неудовлетворительно работавшие в течение семестра, проходят собеседование с преподавателем, который опрашивает студента на предмет освоения дисциплины. При этом студенты должны сдать отчеты по всем лабораторным работам.

Критерии оценки

Ответ оценивается **«зачтено»**, если студент:

полно раскрыл содержание материала в области, предусмотренной программой; изложил материал грамотным языком в определенной логической последовательности, точно использовал терминологию; показал умения иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами из практики; продемонстрировал усвоение изученных сопутствующих вопросов, сформированность и устойчивость знаний; отвечал самостоятельно без наводящих вопросов; возможны одна – две неточности при освещении второстепенных вопросов.

Ответ оценивается **«незачтено»** в следующих случаях:

не раскрыто основное содержание учебного методического материала; обнаружено незнание и непонимание студентом большей или наиболее важной части дисциплины; допущены ошибки в определении понятий, при использовании терминологии, которые не исправлены после нескольких наводящих вопросов преподавателя; допускает ошибки в освещении основополагающих вопросов дисциплины.

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

5.1 Основная литература:

1. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.И. Васильева [и др.]. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 416 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/50168>

5.2 Дополнительная литература:

1. Пентин, Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина. - М. : Мир : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 398 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. : с. 392-393. - ISBN 9785947747652. - ISBN 9785030038469.

2. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии [Текст] : Учебник для студентов вузов. - М. : Изд-во "МИР" Изд-во "АСТ", 2003. - 683с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. : с. 658-661. - ISBN 5030034706. - ISBN 5170187602 : 358.00.

3. Маряхина, В.С. Теоретические основы методов спектрального анализа [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.С. Маряхина, Е.А. Кунавина, Е.А. Строганова ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Оренбургский Государственный Университет. - Оренбург : ОГУ, 2016. - 135 с. — Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=469353>

5.3 Периодические издания:

1. «Журнал прикладной спектроскопии».
2. «Успехи химии».
3. «Координационная химия».
4. «Химия и жизнь».

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

В соответствии с требованиями ФГОС ВО преподавание учебной дисциплины «Масс-спектрометрия неорганических соединений и координационных соединений» предусматривает компетентностный подход в учебном процессе, который основывается на инновационных психолого-педагогических технологиях, направленных на повышение эффективности и

качества формирования профессиональных навыков обучающихся. Основными формами обучения являются: лекции и лабораторные работы.

В разработанной программе использованы активные и интерактивные формы обучения: дискуссии, решение индивидуальных экспериментальных задач, работа в составе малых групп.

Для успешного освоения дисциплины «Масс-спектрометрия неорганических соединений и координационных соединений» каждый студент обеспечивается учебно-методическими материалами (тематическими планами лекций и лабораторных занятий, учебно-методической литературой, лабораторными практикумами).

Различные виды учебной работы, включая самостоятельную работу студента, способствуют овладению культурой мышления, способностью в письменной и устной речи логически правильно оформить основные положения дидактических единиц дисциплины, т.е. формируется системный подход к анализу химической информации, восприятию инноваций, что способствует готовности к самосовершенствованию, самореализации, личностной и предметной рефлексии.

Тематика лекций и лабораторных работ соответствует содержанию программы дисциплины.

Лекции читают по наиболее важным разделам программы. Они носят проблемный характер и формируют у студентов системное представление об изучаемых разделах предмета, обеспечивают усвоение ими основных принципов и положений дисциплины «Масс-спектрометрия неорганических соединений и координационных соединений», а также готовность к восприятию научно-технических инноваций и технологий.

Лабораторные работы обеспечивают приобретение и закрепление необходимых навыков и умений, формируют профессиональные компетенции, готовность к самостоятельной и индивидуальной работе, принятию ответственных решений в рамках профессиональной деятельности.

Лабораторные занятия проводятся с целью усвоения студентами основных теоретических, методических и организационных разделов программы, а также выработки и закреплению навыков практических умений.

Отдельные темы разделов дисциплины студенты прорабатывают самостоятельно. Содержание самостоятельной работы: чтение основной и рекомендуемой дополнительной литературы, решение ситуационных задач, что способствует развитию познавательной активности, творческого мышления студентов, прививает навыки самостоятельного поиска информации, а также формирует способность и готовность к самосовершенствованию, самореализации и творческой адаптации.

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

7. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю)

7.1 Перечень информационных технологий.

– Использование электронных презентаций при проведении лекционных занятий.

7.2 Перечень необходимого лицензионного программного обеспечения

В процессе освоения дисциплины используется следующее программное обеспечение: Microsoft Windows, Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint).

7.3 Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

1. Справочно-правовая система «Консультант Плюс»
(<http://www.consultant.ru>)

2. Портал открытых данных Российской Федерации
<https://data.gov.ru>
3. База открытых данных Министерства труда и социальной защиты РФ
<https://rosmintrud.ru/opendata>
4. База данных Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
<https://elibrary.ru/>
5. База данных Всероссийского института научной и технической информации (ВИНИТИ) РАН <http://www2.viniti.ru/>
6. Базы данных в сфере интеллектуальной собственности, включая патентные базы данных www.rusnano.com
7. Базы данных и аналитические публикации «Университетская информационная система РОССИЯ» <https://uisrussia.msu.ru/>
8. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов. URL: <http://fcior.edu.ru/>.
9. Российский образовательный портал. URL: <http://www.school.edu.ru/>
10. Интернет сайты ведущих государственных ВУЗов и научных организаций РФ: МГУ, СПбГУ, РХТУ, НГУ, КубГУ, РАН РФ и др.
11. Зарубежные ведущие научные и учебные центры: NBS USA, MTI UK, ChLab Japan, NSRDS и др.
12. Химический каталог: химические ресурсы Рунета <http://www.ximicat.com/>
13. Портал фундаментального химического образования России <http://www.chemnet.ru>
14. Химик: сайт о химии для химиков <http://www.xumuk.ru/>
15. Химический сервер <http://www.Himhelp.ru>
16. База данных масс-спектров. Режим доступа: <http://www.massbank.jp>
17. Масс-спектрометрия – химическая энциклопедия / <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2448.html>

8. Материально-техническое обеспечение по дисциплине (модулю)

№	Вид работ	Наименование учебной аудитории, ее оснащённость оборудованием и техническими средствами обучения
1	Лекционные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: комплект учебной мебели, меловая доска (аудитория 425с).

2	Лабораторные работы	Учебная аудитория для проведения занятий лабораторного типа, укомплектованная специализированной мебелью, вытяжной системой вентиляции, меловой доской, средствами пожарной безопасности и оказания первой медицинской помощи, лабораторное оборудование: масс-спектрометр, наборы химической посуды и реактивов, водяные бани, вакуумные насосы, термометры, магнитные мешалки с подогревом (аудитория 422с)
3	Самостоятельная работа	Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспеченная доступом в электронную информационно- образовательную среду университета, (аудитория 431с).
4	Групповые (индивидуальные) консультации, текущий контроль, промежуточная аттестация	аудитория 136С