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

Хагуров Т.А.

2023г.

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

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 М.А. Назаренко, доцент, канд. хим. наук

Рабочая программа дисциплины МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии (разработчика) протокол № 7 «04» апреля 2023 г.

Заведующий кафедрой общей, неорганической химии и ИВТ в химии к.х.н., доцент Волынкин В.А.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий протокол № 7 от «17» мая 2023 г. Председатель УМК факультета Беспалов А.В.

Рецензенты:

Фролов В.Ю., канд. хим. наук, директор ООО «Ланэс». Доценко В.В., д-р хим. наук, профессор кафедры органической химии и технологий ФГБОУ ВО «КубГУ».

1 Цели и задачи изучения дисциплины (модуля)

1.1 Цель освоения дисциплины.

Целью освоения дисциплины «Масс-спектрометрия неорганических соединений координационных соединений» является содействие формированию студентов обще-профессиональных И развитию У 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-спектрометрия неорганических и 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 неорганических и органических веществ методом масс-спектрометрии.
- Сформировать представления о возможности применения метода массспектрометрии.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Масс-спектрометрия неорганических соединений и координационных соединений» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 "Дисциплины (модули)" учебного плана направления подготовки 04.03.01 «Химия». В соответствии с рабочим учебным планом дисциплина изучается на 3 курсе. Вид промежуточной аттестации: зачет.

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 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине			
ПК-2 Способен применять современную аппаратуру при проведении научных исследований, а также обрабатывать и анализировать полученные результаты				
ИПК-2.1. Осуществляет исследование	Знает применение метода масс-спектрометрии			
химических соединений и материалов с	для анализа и идентификации неорганических			
использованием современного	и координационных соединений,			
химического оборудования	способы пробоподготовки для анализа			
	методом масс-спектрометрии,			
	Умеет оценивать возможности применения			
	метода масс-спектрометрии для анализа			
	различных неорганических и			
	координационных соединений			
	Владеет навыками проведения химического			
	эксперимента для решения профессиональных			
	задач			
ИПК-2.2. Обрабатывает и анализирует	Знает основные принципы расшифровки масс-			
экспериментальные данные, полученные с	спектров			
использованием современной химической	Умеет расшифровывать масс-спектры,			
аппаратуры	проводить пробоподготовку образцов для			
	анализа методом масс-спектрометрии			
	Владеет основными методами получения и			
	исследования химических веществ и реакций,			
	навыками обработки и анализа полученных			
	экспериментальных данных			
	ные теоретические представления химической			
науки для анализа экспериментальных д				
ИПК-3.1. Использует современные	Знает основные программы, позволяющие			
теоретические представления химической	обрабатывать масс-спектры, наиболее крупные			
науки в своей профессиональной	базы данных по масс-спектрам.			
деятельности	Умеет использовать базы данных по масс-			
	спектрам неорганических и координационных			
	соединений			
	Владеет опытом использования масс-			
	спектроскопии в процессе проведения научных			
ИПК-3.2. Интерпретирует результаты	исследований			
ИПК-3.2. Интерпретирует результаты химического эксперимента на основе	Знает основные теоретические представления об масс-спектроскопии органических и			
современных теоретических	оо масс-спектроскопии органических и неорганических веществ			
представлений	Умеет планировать проведение физико-			
	химического эксперимента, а также			
	интерпретировать полученные данные при			
	анализе неорганических и координационных			
	соединений			
	Владеет методами обработки результатов			
	научных экспериментов с помощью			
	nay man skenephinemos e nomondato			

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
	современных компьютерных технологий

Структура и содержание дисциплины Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц (108 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице

	Виды работ	Всего	Форма обучения
		часов	очная
			5
			семестр
			(часы)
Контактная раб	ота, в том числе:		
Аудиторные заня	нтия (всего):	52,2	52,2
занятия лекционн	ого типа	16	16
лабораторные зан	R ИТR	34	34
практические заня	R ИТЕ	-	-
семинарские заня	РИ Т	-	-
Иная контактная			
Контроль самосто	ятельной работы (КСР)	2	2
Промежуточная а	ттестация (ИКР)	0,2	0,2
Самостоятельная	я работа, в том числе:	55,8	55,8
Курсовая работ	ma	-	-
Проработка уч	иебного (теоретического)	28	28
материала		20	20
Выполнение ин	дивидуальных заданий		
(подготовка со	ообщений, презентаций)	-	-
Реферат		-	-
Подготовка к теку	ицему контролю	27,8	27,8
Контроль:			
Подготовка к экзамену			27,8
Общая	час.	108	108
трудоемкость	в том числе контактная работа	52,2	52,2
	зач. ед	3	3

2.2 Содержание дисциплины

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

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

	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
№		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	CPC
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
	Итого по дисциплине:		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 Содержание разделов (тем) дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№	Наименование раздела (темы)	Содержание раздела (темы)	Форма текущего контроля	
1	2	3	4	
1.	Общие понятия и	Исторический обзор. Блок-схема масс-	Устный опрос	
	основные определения	спектрометра. Основные принципы метода		
	масс-спектрометрии	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.		
2.	Macc-	Общие представления о масс-	Устный опрос	
	спектрометрические	спектрометрическом методе анализа.		

№	Наименование раздела (темы)	Содержание раздела (темы)	Форма текущего контроля
1	2	3	4
	методы анализа	Аналитическая характеристика метода. Способы ионизации и их аналитическое использование. Принцип работы и схема масс-спектрометра с магнитным массанализатором. Применение массспектрометрии для анализа. Определение примесей в твердых веществах методом искровой масс-спектрометрии.	
3.	Методы ионизации веществ в молекулярном анализе	Методы ионизации газов и летучих жидкостей. Электронная ионизация 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 спрейметодов. Матрично-десорбционные методы анализа. ВИМС и МАЛДИ.	

2.3.2 Занятия семинарского типа практические / семинарские занятия/ лабораторные работы)

№	Наименование раздела (темы)	Тематика занятий/работ	Форма текущего контроля
1.	Общие понятия и основные	«Блок-схема масс-спектрометра. Основные принципы метода масс-спектрометрии»	ЛР1
	определения масс- спектрометрии		
	Общие понятия и основные определения масс-спектрометрии	«Работа с библиотекой масс-спектров»	ЛР2
3.	Масс- спектрометрические методы анализа спектрометрии	Часть 1 «Установление структуры вещества по масс-спектру с использованием баз данных»	ЛР3
4.	Масс- спектрометрические методы анализа	Часть 2 «Установление структуры вещества по масс-спектру с использованием баз данных»	ЛР3
5.	Масс- спектрометрические методы анализа	Часть 1 «Изучение процессов фрагментации»	ЛР4
6.	Масс- спектрометрические методы анализа	Часть 2 «Изучение процессов фрагментации»	ЛР4
7.	Macc-	Часть 1 «Ручная расшифровка масс-спектров и	ЛР5

	I	1	
		построение схемы фрагментации	
0	методы анализа	соответствующих соединений»	HD.
8.	Macc-	Часть 2 «Ручная расшифровка масс-спектров и	ЛР5
	спектрометрические	построение схемы фрагментации	
	методы анализа	соответствующих соединений»	
9.	Macc-	Часть 1 «Постройте хроматограммы по	ЛР6
	спектрометрические	отдельным ионам, характериизующим наличие	
	методы анализа	заданного класса соединений»	
10.	Macc-	Часть 2 «Постройте хроматограммы по	ЛР6
	спектрометрические	отдельным ионам, характериизующим наличие	
	методы анализа	заданного класса соединений»	
11.	Методы ионизации	Часть 1 «Анализ смеси веществ методом	ЛР7
	веществ в	хроматомасс-спектрометрии»	
	молекулярном		
	анализе		
12.	Методы ионизации	Часть 2 «Анализ смеси веществ методом	ЛР7
	веществ в	хроматомасс-спектрометрии»	
	молекулярном		
	анализе		
13.	Методы ионизации	Часть 1 «Анализ состава координационных	ЛР8
	веществ в	соединений d- и f- элемсентов»	
	молекулярном		
	анализе		
14.	Методы ионизации	Часть 2 «Анализ состава координационных	ЛР8
	веществ в	соединений d- и f- элемсентов»	
	молекулярном		
	анализе		
15.	Методы ионизации	«Определение состава железных и медных	Л9
	веществ в	сплавов»	
	молекулярном		
	анализе		
16.	Методы ионизации	Часть 1 «Идентификация медицинских	ЛР10
	веществ в	препаратов»	
	молекулярном		
	анализе		
17.	Методы ионизации	Часть 2 «Идентификация медицинских	ЛР10
	веществ в	препаратов»	
	молекулярном		
	анализе		
	<u> </u>	I	l .

Защита лабораторной работы (ЛР)

2.3.3 Примерная тематика курсовых работ (проектов) Курсовые работы – не предусмотрены

№	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 ходе изучения дисциплины предусмотрено использование следующих образовательных технологий: метод проблемного изложения материала; самостоятельное чтение студентами учебно-методической и справочной

литературы и последующей свободной дискуссии по освоенному ими материалу; использование, иллюстративных видеоматериалов с помощью мультимедийного оборудования. Технологии личностно-ориентированного обучения, позволяющие создавать индивидуальные образовательные технологии.

Компетентностный подход в рамках преподавания дисциплины реализуется в использовании интерактивных технологий и активных методов (проблемная лекция, работа в малых группах) в сочетании с внеаудиторной работой.

Информационные технологии, применяемые при изучении дисциплины: использование информационных ресурсов, доступных в информационнот телекоммуникационной сети Интернет.

Адаптивные образовательные технологии, применяемые при изучении дисциплины — для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Оценочные средства предназначены для контроля и оценки образовательных достижений обучающихся, освоивших программу учебной дисциплины «Химия координационных соединений».

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.

Структура оценочных средств для текущей и промежуточной аттестации

	Код и наименование		Наименование оцен	ючного средства
№	индикатора	Результаты обучения		Промежуточная
п/п	(в соответствии с п.	(в соответствии с п. 1.4)	Текущий контроль	аттестация
	1.4)			
1	ИПК-2.1. Осуществляет исследование химических соединений и материалов с использованием	Знает применение метода масс-спектрометрии для анализа и идентификации неорганических и координационных соединений, способы пробоподготовки для	Устный опрос	Вопрос на зачете
	современного химического оборудования	анализа методом масс- спектрометрии, Умеет оценивать возможности применения метода масс-спектрометрии	Лабораторная работа	Вопрос на зачете
		для анализа различных		

		наарганинаагич н		
		неорганических и		
		координационных соединений		
		Владеет навыками	Лабораторная	Вопрос на
		проведения химического	работа	зачете
		эксперимента для решения		
		профессиональных задач		
		<u> </u>	Устный опрос	Вопрос на
		Знает основные принципы	эстный опрос	зачете
		расшифровки масс-спектров		34 1010
	ИПК-2.2.	Умеет расшифровывать масс-	Лабораторная	Вопрос на
	Обрабатывает и	спектры, проводить	работа	зачете
	анализирует	пробоподготовку образцов		
	экспериментальные	для анализа методом масс-		
2	данные, полученные	спектрометрии		
	с использованием	Владеет основными методами	Лабораторная	Вопрос на
	современной		работа	зачете
	химической	получения и исследования	F	
	аппаратуры	химических веществ и		
		реакций, навыками обработки		
		и анализа полученных		
		экспериментальных данных		
	ИПК-3.1.	Знает основные программы,	Устный опрос	Вопрос на
	Использует	позволяющие обрабатывать		зачете
	современные	масс-спектры, наиболее		
	теоретические	крупные базы данных по		
	представления	масс-спектрам.		
	химической науки в	Умеет использовать базы	Лабораторная	Вопрос на
	своей	данных по масс-спектрам	работа	зачете
3		неорганических и		
	профессиональной	координационных соединений		
	деятельности	Владеет опытом	Лабораторная	Вопрос на
		использования масс-	работа	зачете
		спектроскопии в процессе		
		1 1 '		
		проведения научных		
	HITTIC O O	исследований	37 0	D
	ИПК-3.2.	Знает основные	Устный опрос	Вопрос на
	Интерпретирует	теоретические представления		зачете
	результаты	об масс-спектроскопии		
	химического	органических и		
	эксперимента на	неорганических веществ		
	основе современных теоретических	Умеет планировать	Лабораторная	Вопрос на
	представлений	проведение физико-	работа	зачете
	представлении	химического эксперимента, а		
4		также интерпретировать		
		полученные данные при		
		анализе неорганических и		
		координационных соединений		
		Владеет методами обработки	Лабораторная	Вопрос на
		-	работа	зачете
		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 диссо- циации;
- б) возбужденный анион-радикал, образующийся при приня- тии 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 четноэлектронные нейтральные молекулы могут элиминировать, тогда как ионы (четное число электронов) могут терять лишь нейтральные четно-электронные частицы, но не ра- дикалы;
- 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 С4Н8О.
- а) бензойная кислота;
- б) бутанон;
- в) бутанол;
- г) бутаналь.
- 2. В чем заключается перегруппировка Мак-Лафферти?
- а) миграция атома водорода через четырех членное переход- ное состояние, сопровождающаяся выделением нейтральной молекулы;
- б) миграция атома водорода через шестичленное переходное состояние, сопровождающаяся выделением нейтральной молекулы;
- в) выброс нейтральной молекулы при участии атомов водо- рода 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 %).
- a) C7H6O2;
- б) С6Н12;
- в) C4H4N;
- г) С7Н8О.

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	«ОТЛИЧНО»	повышенный
(в решениях/ответах может		(продвинутый)
присутствовать небольшое число		уровень
неточностей, не носящих		
принципиального характера).		
Одно из трех заданий выполнено	«хорошо»	базовый уровень
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).		
Одно из трех заданий выполнено	1 -	пороговый уровень
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).		
Правильно решена одна задач,	«неудовлетворитель	менее 50%,
остальные полностью не решены,	но»	уровень не
либо не решена ни одна.		сформирован

Отчеты по лабораторным работам

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

Лабораторная работа №7

Анализ смеси органических веществ методом хроматомасс-спектрометрии

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

ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ Комбинированный тандемный квадрупольновремяпролетный 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 тандемной 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.

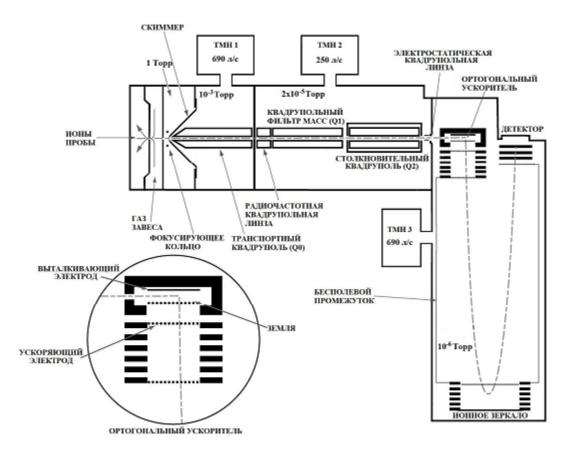


Рис. 1. – Принципиальная схема аналитической части тандемного квадрупольно-времяпролетного масс-спектрометра QStar Elite.

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

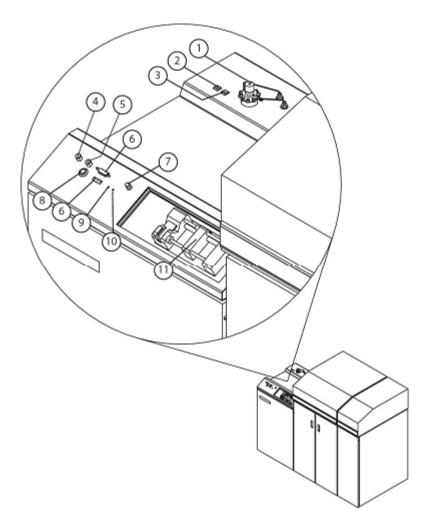


Рис. 2 – Панель источника ионов тандемного квадрупольновремяпролетного масс-спектрометра QStar Elite.

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). квадрупольно-времяпролётный Комбинированный тандемный электрораспылением спектрометр ионов оснащен источником дополнительным горячим потоком осущенного газа (4000 °C) ортогонально к струе заряженных капель из электрораспылителя для повышения скорости испарения растворителя пробы в случае больших потоков. Источник ионов с наблюдать электрораспылением позволяет непосредственно ВВОД 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),
- разъём 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 массспектрометр 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 66 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 ионопровода. 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 Отсутствие нагревательных элементов пучка. обеспечивают возможность анализа даже неустойчивых комплексов. Область, в располагается транспортный радиочастотный которой 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 О1 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 (ТОF) 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 $(2\cdot10-5-5\cdot10-6\,\text{Topp})$.

Столкновительная ячейка.

ячейка Столкновительная предназначена ДЛЯ контролируемой диссоциации родительских ионов массы, выбранной квадрупольным фильтром. результате такой диссоциации дочерние 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 осуществляет Q2 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-рефлектрон 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 2·10⁻⁶. Точность определения массы без внутреннего стандарта составляет менее 5.10-6. Частота сбора данных составляет до 20 спектров/с при скорости работы детектора 7,6 ГГц. Линейный динамический диапазон составляет 1.104 импульсов/с. Область времяпролетного масс-спектрометра откачивается турбомолекулярным насосом до давления $(1.10^{-6} - 7.10^{-7} \text{ Topp}).$

Детектор.

Масс-спектрометр оснащен вторично-электронным умножителем на основе сборки микроканальных пластин с коэффициентом умножения 106. 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 MACC-СПЕКТРОМЕТРОМ QSTAR ELITE.

Конструктивно масс-спектрометр состоит из аналитической стойки, насоса предварительной откачки, генератора азота, отдельно стоящего компьютера. В аналитической стойке (рис. 3.3) находятся камера анализатора (с расположенными в ней источником ионов, интерфейсом дифференциальной квадрупольным анализатором, столкновительной откачки. времяпролетным анализатором и детектором), элементы вакуумной системы и блоки их питания: три турбомолекулярных насоса; общий выключатель выключатель питания стойки высоковакуумной питания, И 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 1·10-6 мм. рт. ст. При этом лампочка «Status» должна перестать мигать и постоянно гореть зеленым светом.
 - 5. Включить компьютер и запустить программу «QSAlalyst 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	«зачтено»	пороговый уровень
составе малой группы выполнил		
лабораторную работу,		
предусмотренную учебным планом,		
а также дает ответы на вопросы по		
этой работе при ее защите		
преподавателю.		
Студент не выполнил лабораторную	«не зачтено»	уровень не
работу, либо не способен ответить		сформирован
на вопросы при ее защите.		

Перечень лабораторных работ

Тематика занятий/работ	Nº
«Блок-схема масс-спектрометра. Основные принципы метода масс- спектрометрии»	ЛР1
«Работа с библиотекой масс-спектров»	ЛР2
Часть 1 «Установление структуры вещества по масс-спектру с	ЛР3
использованием баз данных»	
Часть 2 «Установление структуры вещества по масс-спектру с использованием баз данных»	ЛР3
Часть 1 «Изучение процессов фрагментации»	ЛР4
Часть 2 «Изучение процессов фрагментации»	ЛР4
Часть 1 «Ручная расшифровка масс-спектров и построение схемы фрагментации соответствующих соединений»	ЛР5
Часть 2 «Ручная расшифровка масс-спектров и построение схемы фрагментации соответствующих соединений»	ЛР5
Часть 1 «Постройте хроматограммы по отдельным ионам, характериизующим наличие заданного класса соединений»	ЛР6
Часть 2 «Постройте хроматограммы по отдельным ионам, характериизующим наличие заданного класса соединений»	ЛР6
Часть 1 «Анализ смеси веществ методом хроматомасс- спектрометрии»	ЛР7
Часть 2 «Анализ смеси веществ методом хроматомасс- спектрометрии»	ЛР7
Часть 1 «Анализ состава координационных соединений d- и f- элемсентов»	ЛР8
Часть 2 «Анализ состава координационных соединений d- и f- элемсентов»	ЛР8
«Определение состава железных и медных сплавов»	Л9
Часть 1 «Идентификация медицинских препаратов»	ЛР10
Часть 2 «Идентификация медицинских препаратов»	ЛР10

Указания к составлению отчётов о выполнении работы

Все наблюдения и выводы по экспериментальной работе следует заносить в рабочий журнал, отражающий всю работу студента. На обложке или на первой странице журнала должны быть написаны фамилия студента, его инициалы, номер группы и название практикума. Записи в

журнале производят только чернилами, лаконично, аккуратно, непосредственно после проведения опыта. Запись должна содержать:

- 1. Дату выполнения работы.
- 2. Название темы и название опыта
- 3. Последовательность проведения операций опыта.
- 4. Описание условий проведения опыта.
- 5. Рисунок или схему используемого прибора.
- 6. Уравнения всех происходящих в опытах реакций.
- 7. Изменение окраски веществ, выделение и характер осадка.
- 8. Расчеты, проводимые при выполнении работы.
- 9. Ответы на поставленные в руководстве вопросы.
- 10. Выводы.

Критерии оценки

Критерии	Оценка	Уровень
Владение навыками планирования,	зачтено	повышенный
прогнозирования и проведения		(продвинутый)
химического эксперимента, безопасной		уровень
работы в химической лаборатории;		
владение приемами разработки и		
реализации методов синтеза		
координационных соединений;		
владение техникой эксперимента,		
приемами измерения физических		
величин с заданной точностью;		
владение навыками работы на		
приборах, анализа и интерпретации		
полученных экспериментальных		
результатов.		
Владение навыками проведения	зачтено	базовый уровень
химического эксперимента, безопасной		
работы в химической лаборатории;		
владение методами синтеза		
координационных соединений;		
владение техникой эксперимента,		
приемами измерения физических		
величин с заданной точностью;		
владение навыками работы на		
приборах, анализа и интерпретации		

полученных экспериментальных		
результатов.		
Отсутствие владения навыками	не зачтено	уровень
химического эксперимента, безопасной		не сформирован
работы в химической лаборатории;		
невладение методами синтеза		
координационных соединений;		
отсутствие владения техникой		
эксперимента, приемами измерения		
физических величин с заданной		
точностью; отсутствие владения		
навыками работы на приборах, анализа		
и интерпретации полученных		
экспериментальных результатов.		

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

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

- Блок-схема масс-спектрометра. 1.
- Основные принципы метода масс-спектрометрии. 2.
- Системы ввода пробы в масс-спектрометр. 3.
- 4.
- Основные задачи масс-спектрометрии в аналитике и биофизике . Общие представления о масс-спектрометрическом методе анализа. Аналитическая характеристика метода масс-спектрометрии. 5.
- Способы ионизации и их аналитическое использование. 7.
- Принцип работы и схема масс-спектрометра с магнитным масс-8. анализатором.
- Применение масс-спектрометрии для анализа органических соединений и 9. элементного и изотопного анализа.
- 10. Определение примесей в твердых веществах методом искровой массспектрометрии.

- Методы ионизации газов и летучих жидкостей.
 Электронная ионизация веществ в газовой фазе.
 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.
- Электроспрей-методы ионизации.
 Газодинамические интерфейсы спрей-методов.

21. Матрично-десорбционные методы анализа биоорганических веществ.

Критерии оценивания по зачету:

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.

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.

5. Перечень учебной литературы, информационных ресурсов и технологий

5.1 Учебная 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
- 2. 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.

https://www.studmed.ru/pentin-yu-a-kuramshina-g-m-osnovy-molekulyarnoy-spektroskopii_57acfe77014.html

3. 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.

https://www.studmed.ru/pentin-yu-a-vilkov-l-v-fizicheskie-metody-issledovaniya-v-himii 5ff6dc84429.html

4. 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

5.2 Периодическая литература

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

5.3. Интернет-ресурсы, в том числе современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Электронно-библиотечные системы (ЭБС):

- 1. ЭБС «ЮРАЙТ» https://urait.ru/
- 2. 9EC «BOOK.ru» https://www.book.ru
- 3. ЭБС «ZNANIUM.COM» www.znanium.com
- 4. ЭБС «ЛАНЬ» https://e.lanbook.com
- 5. Консультант плюс справочная система (доступ с локальной сети компьютеров библиотеки).

Профессиональные базы данных

- 1. Scopus http://www.scopus.com/
- 2. ScienceDirect https://www.sciencedirect.com/
- 3. Журналы издательства Wiley https://onlinelibrary.wiley.com/
- 4. Научная электронная библиотека (НЭБ) http://www.elibrary.ru/
- 5. Полнотекстовые архивы ведущих западных научных журналов на Российской платформе научных журналов НЭИКОН http://archive.neicon.ru
- 6. Национальная электронная библиотека (доступ к Электронной библиотеке диссертаций Российской государственной библиотеки (РГБ) https://rusneb.ru/
- 7. Президентская библиотека им. Б.Н. Ельцина https://www.prlib.ru/
- 8. База данных CSD Кембриджского центра кристаллографических данных (CCDC) https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/
- 9. Springer Journals: https://link.springer.com/
- 10. Springer Journals Archive: https://link.springer.com/
- 11. Nature Journals: https://www.nature.com/
- 12. Springer Nature Protocols and Methods: https://experiments.springernature.com/sources/springer-protocols
- 13. Springer Materials: http://materials.springer.com/
- 14. Nano Database: https://nano.nature.com/
- 15. Springer eBooks (i.e. 2020 eBook collections): https://link.springer.com/
- 16. "Лекториум ТВ" http://www.lektorium.tv/

Информационные справочные системы

1. Консультант Плюс - справочная правовая система (доступ по локальной сети с компьютеров библиотеки)

Ресурсы свободного доступа

- 1. КиберЛенинка http://cyberleninka.ru/;
- 2. Американская патентная база данных http://www.uspto.gov/patft/
- 3. Министерство науки и высшего образования Российской Федерации https://www.minobrnauki.gov.ru/;
- 4. Федеральный портал "Российское образование" http://www.edu.ru/;
- 5. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" http://window.edu.ru/;
- 6. Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов http://school-collection.edu.ru/.
- 7. Проект Государственного института русского языка имени А.С. Пушкина "Образование на русском" https://pushkininstitute.ru/;
- 8. Справочно-информационный портал "Русский язык" http://gramota.ru/;
- 9. Служба тематических толковых словарей http://www.glossary.ru/;
- 10. Словари и энциклопедии http://dic.academic.ru/;
- 11. Образовательный портал "Учеба" http://www.ucheba.com/;
- 12. Законопроект "Об образовании в Российской Федерации". Вопросы и ответы http://xn--273--84d1f.xn--p1ai/voprosy i otvety

Собственные электронные образовательные и информационные ресурсы КубГУ

- 1. Электронный каталог Научной библиотеки КубГУ http://megapro.kubsu.ru/MegaPro/Web
- 2. Электронная библиотека трудов ученых КубГУ http://megapro.kubsu.ru/MegaPro/UserEntry?Action=ToDb&idb=6
- 3. Среда модульного динамического обучения http://moodle.kubsu.ru
- 4. База учебных планов, учебно-методических комплексов, публикаций и конференций http://infoneeds.kubsu.ru/
- 5. Библиотека информационных ресурсов кафедры информационных образовательных технологий http://mschool.kubsu.ru;
- 6. Электронный архив документов КубГУ http://docspace.kubsu.ru/
- 7. Электронные образовательные ресурсы кафедры информационных систем и технологий в образовании КубГУ и научно-методического журнала "ШКОЛЬНЫЕ ГОДЫ" http://icdau.kubsu.ru/

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

Успешное изучение дисциплины «Масс-спектрометрия неорганических соединений и координационных соединений» требует от студентов регулярного посещения лекций, а также активной работы на практических занятиях, выполнения и защиты лабораторных работ, ознакомления с основной и дополнительной рекомендуемой литературой.

При подготовке к лекционному занятию студентам рекомендуется:

- 1) просмотреть записи предыдущей лекции и восстановить в памяти ранее изученный материал;
- 2) бегло просмотреть материал предстоящей лекции, с целью лучшего усвоения нового материала;
- 3) самостоятельно проработать отдельные фрагменты темы прошлой лекции, если это необходимо.

При конспектировании лекционного материала студентам нужно стремиться кратко, схематично, последовательно и логично фиксировать основные положения, выводы, обобщения и формулировки, не пытаясь записать весь преподаваемый материал слово в слово.

При подготовке к лабораторному занятию рекомендуется:

- 1) внимательно изучить материал предстоящей работы и составить план ее выполнения;
- 2) уделить повышенное внимание экспериментальным особенностям предстоящей работы (используемым реактивам и оборудованию, а также технике работы с ними);

Выполнять лабораторную работу необходимо аккуратно и последовательно, отражая все ее основные этапы в лабораторном журнале. Для успешной защиты лабораторной работы необходимо тщательно изучить лекционный и, если это необходимо, дополнительный теоретический материал по теме работы, а также правильно заполнить лабораторный журнал, сделав все необходимые расчеты и сформулировав выводы по проделанной работе.

При подготовке к устному опросу рекомендуется:

- 1) ознакомиться с темой и планом занятия, чтобы выяснить круг вопросов, которые будут обсуждаться на занятии;
- 2) поработать с конспектом лекции по теме занятия, а также ознакомиться с рекомендуемой литературой и (при необходимости) дополнительными источниками информации в виде периодических изданий и Интернет-ресурсов.

Самостоятельная работа наряду с аудиторной представляет одну из форм учебного процесса. Самостоятельная работа — это важнейших планируемая работа студентов, выполняемая по заданию и при методическом преподавателя, руководстве но без его непосредственного Самостоятельная работа предназначена не только ДЛЯ овладения представленной дисциплиной, но и для формирования навыков работы вообще, в учебной, научной, профессиональной деятельности, способности принимать

на себя ответственность, самостоятельно решать возникающие проблемы, находить правильные решения и т.д.

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. Материально-техническое обеспечение по дисциплине (модулю)

Наименование	Оснащенность	Перечень лицензионного
специальных помещений	специальных помещений	программного обеспечения
Учебные аудитории для	Мебель: учебная мебель	Microsoft Windows;
проведения занятий	Технические средства	Microsoft Office
1 ''	обучения:	Wherosoft Office
лекционного типа	•	
V	экран, проектор, компьютер	Microsoft Windows
Учебные аудитории для	Мебель: учебная мебель	Microsoft Windows;
проведения занятий	Технические средства	Microsoft Office
семинарского типа,	обучения:	
групповых и	экран, проектор, компьютер	
индивидуальных		
консультаций, текущего		
контроля и промежуточной		
аттестации		
Учебные аудитории для	Учебная лаборатория,	Microsoft Windows;
проведения лабораторных	укомплектованная	Microsoft Office
работ. Лаборатория 435С.	специализированной	
	мебелью, вытяжной	
	системой вентиляции,	
	меловыми досками,	
	средствами пожарной	
	безопасности и оказания	
	первой медицинской	
	помощи, лабораторным	
	оборудованием: весы	
	технохимические,	
	электрические плитки,	
	наборы химической посуды	
	и реактивов, водяные бани,	
	термометры, магнитные	
	мешалки с подогревом	

	ММ-135Н «Таглер», рН-метр «Эксперт-001-3.04», спектрофотометр В-1100 ЭКОВЬЮ, лабораторный источник питания ПРОФКИП Б5-71/1М, весы аналитические Adventurer Pro AV114C	
Учебные аудитории для	Курсовая работа не предусмотрена учебным планом.	
курсового проектирования (выполнения курсовых работ)		

Для самостоятельной работы обучающихся предусмотрены помещения, укомплектованные специализированной мебелью, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.

Наименование помещений	Оснащенность помещений	Перечень лицензионного
для самостоятельной	для самостоятельной	программного обеспечения
работы обучающихся	работы обучающихся	
Помещение для	Мебель: учебная мебель	Microsoft Windows;
самостоятельной работы	Комплект	Microsoft Office
обучающихся (читальный	специализированной	
зал Научной библиотеки)	мебели: компьютерные	
	столы	
	Оборудование:	
	компьютерная техника с	
	подключением к	
	информационно-	
	коммуникационной сети	
	«Интернет» и доступом в	
	электронную	
	информационно-	
	образовательную среду	
	образовательной	
	организации, веб-камеры,	
	коммуникационное	
	оборудование,	
	обеспечивающее доступ к	
	сети интернет (проводное	
	соединение и беспроводное	
	соединение по технологии	
	Wi-Fi)	
Помещение для	Мебель: учебная мебель	Microsoft Windows;
самостоятельной работы	Комплект	Microsoft Office
обучающихся (ауд. 431С)	специализированной	

мебели: компьютерные столы Оборудование: компьютерная техника подключением информационнокоммуникационной «Интернет» и доступом в электронную информационнообразовательную среду образовательной веб-камеры, организации, коммуникационное оборудование, обеспечивающее доступ к сети интернет (проводное соединение и беспроводное соединение по технологии Wi-Fi)