

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Масс-спектрометрия в физической химии

Уровень высшего образования:

Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Физическая химия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Масс-спектрометрия в физической химии**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь самостоятельно составлять план исследования Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
СПК-1.С. Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	Знать основные принципы работы масс-спектрального оборудования Владеть физико-химическим аппаратом масс-спектральных методов
СПК-2.С. Способность проводить экспериментальные исследования в избранной области физической химии (кинетика и катализ, химическая термодинамика, молекулярная спектроскопия, химия поверхности)	Знать этапы масс-спектрального эксперимента Уметь подбирать масс-спектральные методы для решения конкретных задач Владеть навыками применения масс-спектральных методов
СПК-3.С. Способность использовать серийные и оригинальные установки (приборы, комплексы) для определения физико-химических свойств веществ	Знать возможности, преимущества и недостатки масс-спектральных методов Уметь интерпретировать результаты масс-спектральных экспериментов

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 40 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточная аттестация), 32 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать основы базовых дисциплин: "Аналитическая химия", "Органическая химия", "Физическая химия", "Химические основы биологических процессов", "Математический анализ", "Теория вероятностей", "Уравнения математической физики", "Механика/электричество", "Колебания и волны/Оптика", "Элементы строения вещества"

Уметь давать объяснения общеизвестным процессам и феноменам в физике и химии, осуществлять выводы необходимых формул и уравнений.

Владеть общеизвестными экспериментальными методами и подходами в физической химии.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы из них

аттестации по дисциплине (модулю)		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов.п..	Всего
<p>Раздел 1.Принципиальные основы масс-спектрометрии Тема 1. Основные понятия и единицы измерения в масс-спектрометрии. Тема 2. Основные элементы, характеристики и классификация масс-спектрометров. Тема 3. Методы ионизации. Тема 4. Масс-анализаторы. Тема 5. Детектирование ионов. Тема 6. Тандемная масс-спектрометрия</p>	27	8	8	1			17	3	7	10
<p>Раздел 2.Общие аспекты применение масс-спектрометрии. Тема 7. Применение масс-спектрометрии в аналитических целях. Масс-спектрометрия в биологии и медицине. Масс-</p>	18	2	4				6		12	12

спектрометрическая визуализация. Тема 8. Изотопная масс-спектрометрия										
Раздел 3. Масс-спектрометрия в физической химии. Тема 9. Определение энергии ионизации по кривым эффективности ионизации. Тема 10. Эффузионный метод Кнудсена. Высокотемпературная (Кнудсеновская) масс-спектрометрия. Тема 11. Термическая поверхностная ионизация. Метод ион-молекулярных равновесий. Тема 12. Определение энергий ионизации и электронного средства.	25	8	6	1			15	4	6	10
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	2					2	2			
Итого	72	18	18	2		2	40	7	25	32

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и заданий для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. А.Т. Лебедев. *Масс-спектрометрия в органической химии*. Издание Второе переработанное. М.: «Техносфера», 2015
2. В.Г. Заикин, А.В. Варламов, А.И. Микая, Н.С. Простаков. *Основы масс-спектрометрии органических соединений*. М.: МАИК «Наука/Интерпериодика», 2001
3. *Практикум по физической химии: Физические методы исследования*. Под ред. М.Я. Мельникова, Е.П. Агеева и В.В. Лунина. М.: Изд. центр «Академия», 2014
4. А.Т. Лебедев. *Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды*. М.: «Техносфера». 2013
5. В.А. Иоутси, В.Ю. Марков, С.А. Соколов. *Современная масс-спектрометрия*. Методическое пособие по спецкурсу "Современная масс-спектрометрия". М.: МДМ-принт, 2015

Дополнительная литература

1. А.М. Зякун. *Теоретические основы изотопной масс-спектрометрии в биологии*. Пушкино: «Фотон-век», 2010
2. И. Лаваньини, Ф. Маньо, Р. Сералья, П. Тральди. *Количественные методы в масс-спектрометрии*. Пер. с англ. Ю.О. Каратассо. Под ред. Е.Н. Николаева. М.: «Техносфера», 2008
3. В.Ю. Марков, Л.Н. Сидоров. *Применение масс-спектрометрии матрично-активированной лазерной десорбции/ионизации к фуллеренам и их производным*. М.: Отдел оперативной печати и информации Химического факультета МГУ, 2009
4. Л.Н. Сидоров, М.В. Коробов, Л.В. Журавлёва. *Масс-спектральные термодинамические исследования*. М.: Изд. МГУ, 1985
5. Marshall A.G., Comisarow M.B., Parisod G. Relaxation and spectral line shape in Fourier transform ion resonance spectroscopy // *J. Chem. Phys.* 1979. Vol. 71, N 11. P. 4434–4444
6. Spengler B. Post-source decay analysis in matrix-assisted laser desorption/ionization mass spectrometry of biomolecules // *J. Mass Spectrom.* 1997. Vol. 32, N 10. P. 1019–1036
7. Makarov A. Electrostatic axially harmonic orbital trapping: a high-performance technique of mass analysis // *Anal. Chem.* 2000. Vol. 72, N 6. P. 1156–1162
8. Karas M, Krüger R. Ion Formation in MALDI: The Cluster Ionization Mechanism // *Chem. Rev.* 2003. Vol. 103, N 2. P. 427–439
9. Kebarle P., Verkerk U.H. Electrospray: from ions in solution to ions in the gas phase, what we know now // *Mass Spectrom. Rev.* 2009. Vol. 28, N 6. P. 898–917
10. Markov V.Yu., Borschevsky A.Ya., Sidorov L.N. MALDI mass spectrometry of fullerene derivatives // *Int. J. Mass Spectrom.* 2012. Vol. 325–327, N 1. P. 100–112

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

1. Доцент, д.х.н.МарковВиталий Юрьевич, кафедра физической химии, Химический факультет МГУ, markoff5@yandex.ru, +7(495)9395373

2. с.н.с., к.х.н.Иоутси Виталий Алексеевич, кафедра физической химии, Химический факультет МГУ, vitalik_org@mail.ru, +7(495)9395396

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы для зачета

1. Массовое число, точное значение массы, среднее значение массы: определение, различия, единицы измерения.
2. Изотоп, изотопмер, изотопное распределение. Формулы для расчета изотопного распределения.
3. Ионы: заряд и зарядовое число, способы классификации.
4. Масс-спектрометры: основные элементы и системы их поддержки, характеристики, способы классификации.
5. Ионизация газообразных веществ: электронный удар, захват электрона и химическая ионизация. Совместимые устройства ввода.
6. Электронный удар: основные принципы и процессы, достоинства и недостатки, возможности применения.
7. Захват электрона: основные принципы и процессы, достоинства и недостатки, возможности применения.
8. Химическая ионизация: основные принципы и процессы, достоинства и недостатки, возможности применения.
9. Термическая поверхностная ионизация: основные принципы и процессы, возможности применения.
10. Деструктивные методы ионизации: основные принципы и процессы, достоинства и недостатки, возможности применения.
11. Десорбционные методы ионизации: принципиальные особенности, разновидности, области применения.
12. Матрично-активированная лазерная десорбция/ионизация: основные принципы и процессы, роль матрицы, особенности масс-спектрального оборудования.
13. Распылительные методы ионизации: принципиальные особенности, разновидности, области применения.
14. Ионизация электрораспылением: основные принципы и процессы, особенности интерпретации масс-спектра.
15. Магнитный статический масс-анализатор: принцип действия, основное уравнение (с выводом), достоинства и недостатки.
16. Времяпролетный масс-анализатор: принцип действия, основное уравнение (с выводом), достоинства и недостатки.
17. Ионный рефлектор: принцип действия, регистрация метастабильных пиков.

18. Квадрупольный масс-анализатор: принцип действия, области применения.
19. Ион-циклотронный резонанс: принцип действия, достоинства и недостатки, совместимость с методами ионизации.
20. Орбитальная ионная ловушка: принцип действия, достоинства и недостатки, , совместимость с методами ионизации.
21. Детектирования ионов. Величины ионных токов и возможности их измерения: способы умножения и усиления сигналов, счет ионов. Характеристики детекторов.
22. Хромато-масс-спектрометрия: совмещение масс-спектрометра с газовым и жидкостным хроматографом.
23. Хромато-масс-спектрометрия: способы построения хроматограмм, применение tandemной масс-спектрометрии.
24. Применение масс-спектрометрии в биологии и медицине: протеомика, секвенирование, идентификация микроорганизмов.
25. Изотопный анализ: методические основы и области применения.
26. Масс-спектрометрия изотопных отношений легких элементов. Элементы, изотопы и молекулярные формы.
27. Энергия ионизации и энергия появления ионов: способы определения.
28. Вычисления энергий появления из кривых эффективности ионизация.
29. Вертикальная и аддиабатическая энергия появления. Принцип Франка - Кондона.
30. Энергия электронного сродства: способы определения.
31. Эффузионный метод Кнудсена. Уравнение Герца - Кнудсена.
32. Высокотемпературная (кнудсеновская) масс-спектрометрия.
33. Термическая поверхностная ионизация. Уравнения Саха - Ленгмюра. Работа выхода поверхности.
34. Вытягивание ионов из эффузионной ячейки. Области электрического поля в ячейке при приложении к ней потенциала.
35. Метод ион-молекулярных равновесий. Комбинированный ионный источник.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение

Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач
----------------------	-----------------------	------------------------------	---	---

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать основные принципы работы масс-спектрального оборудования Знать этапы масс-спектрального эксперимента методов Знать возможности, преимущества и недостатки масс-спектральных методов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы Уметь самостоятельно составлять план исследования Уметь подбирать масс-спектральные методы для решения конкретных задач Уметь интерпретировать результаты масс-спектральных экспериментов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения Владеть физико-химическим аппаратом масс-спектральных методов Владеть навыками применения масс-спектральных методов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете