

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

САЕ Институт «Умные материалы и технологии»

УТВЕРЖДЕНО:

Директор

И. А. Курзина

Оценочные материалы по дисциплине

Масс-спектрометрия

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

27.04.05 Инноватика

Направленность (профиль) подготовки:

Молекулярная инженерия

Форма обучения

Очная

Образовательная степень

Магистр

Квалификация

Инженер-исследователь

Год приема

2024

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

И.А. Курзина

Председатель УМК

Г.А. Воронова

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1. Способен анализировать, обобщать и использовать фундаментальные и прикладные знания в области биотехнологии для решения существующих и новых задач в профессиональной области.

ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать, обобщать результаты экспериментальных и расчетнотеоретических работ в профессиональной области.

ПК-2. Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК-1.1. Знает основные теоретические положения, экспериментальные и расчетные методы, применяемые в профессиональной области

РООПК-1.2. Знает теоретические основы инструментальных методов исследования веществ и материалов.

РООПК-2.1. Знает основные требования к методам обработки результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ в профессиональной области.

РООПК-2.2. Умеет анализировать, интерпретировать и обобщать данные, представленные в литературе и полученные в результате проведенных исследований в профессиональной области.

РОПК-2.1. Анализировать имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производству химической и биотехнологической продукции и предлагать технические средства для решения поставленных задач.

РОПК-2.2. Организует и осуществляет контроль технологического процесса, входной контроль сырья и материалов, контроль качества выпускаемой продукции.

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

- устный опрос;
- решение задач;
- отчет по лабораторной работе;
- контрольная работа

Устный опрос (ИПК-1.1, ИПК-1.2)

Примеры вопросы для устного опроса:

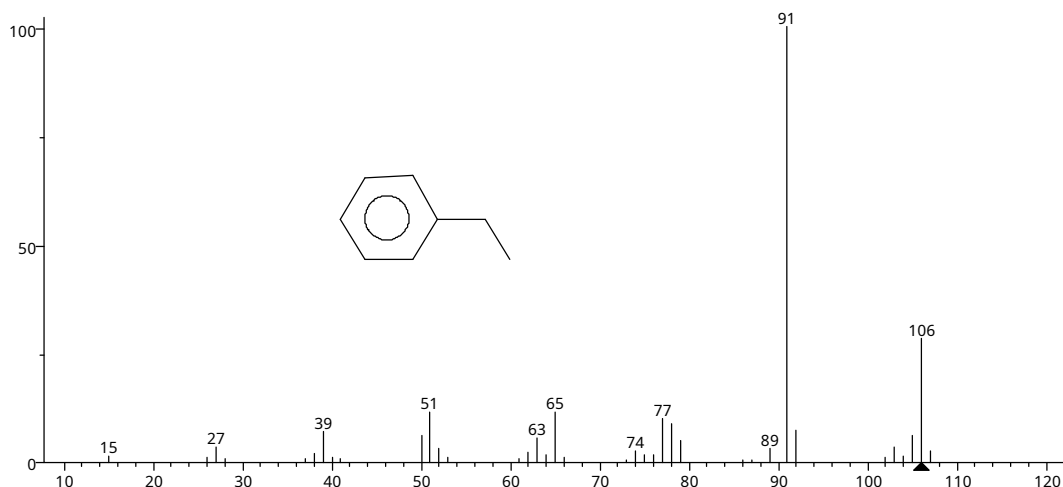
1. Перечислите основные конструктивные элементы масс-спектрометра.
2. Дайте определение терминам: разрешающая способность, скорость сканирования, диапазон измеряемых масс ионов.
3. От чего зависит интенсивность пика на масс-спектре?
4. Как отражается изотопный состав элементов на масс-спектре вещества?
5. Какие методы ионизации применимы для анализа термически стабильных низкомолекулярных, до 1000 а.е.м., органических соединений?
6. Какие методы ионизации используют для анализа термически нестабильных и высокомолекулярных органических соединений?
7. Опишите принципиальную схему источника ионов с химической ионизацией при атмосферном давлении.
8. В чем заключаются преимущества и ограничения метода ионизации электронным ударом?

Решение задач (ИПК-1.1, ИПК-1.2)

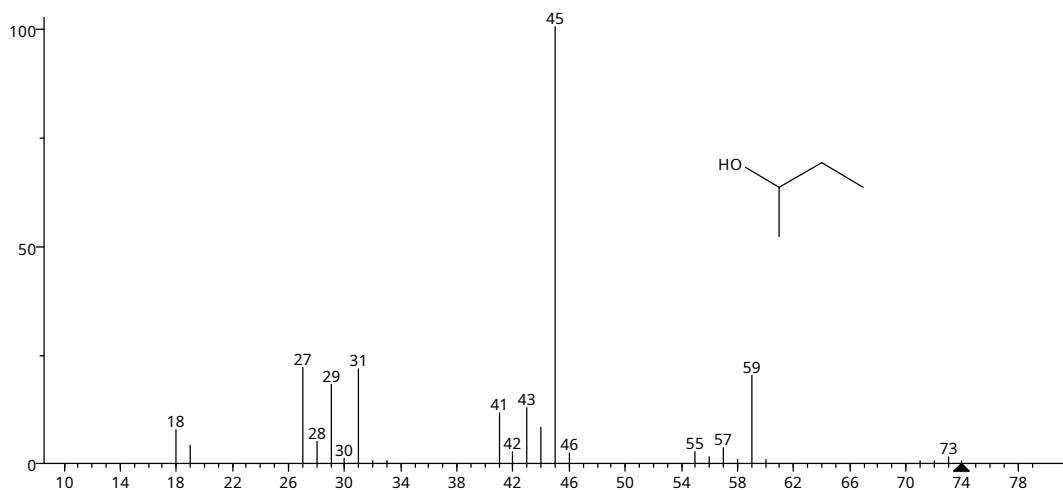
Примеры задач

1. Определите брутто-формулу соединения по интенсивности изотопных пиков на масс-спектре:
а) m/z 170 (100%), 171 (13);
б) 59 (100), 60 (4);
в) 50 (100), 51 (3), 52 (31);
г) 214 (51), 216 (100), 218 (49).
2. Исходя из масс-спектров, предложите возможные пути фрагментации молекулярного иона:

а)



б)



3. Пики каких ионов следует ожидать на масс-спектре следующих соединений (подтвердите свои предположения схемами соответствующих реакций фрагментации):
а) Бензойная кислота;
б) *n*-Октан;
в) Хинолин.

Темы практических работ (ИПК-1.1, ИПК-1.2, ИПК-1.3)

1. Устройство масс-спектрометра. Источники ионизации ESI, APCI.
2. Получение масс-спектров разных классов органических соединений.

3. Установление строения органических соединений. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

Отчет по практической работе состоит из описания хода работ, расчетов (при необходимости) и выводов.

Контрольная работа проводится в письменной форме, содержит 5 теоретических вопросов и оценивается суммарно в 20 баллов. Содержание вопросов соответствует содержанию дисциплины.

Критерии оценивания

- устный опрос, решение задач 0–6 (суммарно 30 баллов)

0 – студент не отвечает на вопросы, не участвует в решении задач;

1 – студент делает попытки отвечать на вопросы, делает много ошибок;

2–4 – студент редко участвует в обсуждении задач, делает попытки находить ответы на задаваемые вопросы;

5–6 – студент активно участвует в обсуждении задач, предлагает решения, в большинстве случаев дает правильные ответы на поставленные вопросы.

- отчеты по практической работе 0–4 балла (суммарно 20 баллов)

0–1 балл – отчет сдан значительно позже даты выполнения, значительные ошибки в оформлении и выполнении, которые не были исправлены;

2–3 балла – отчет сдан позже даты выполнения, есть незначительные ошибки в оформлении, которые самостоятельно исправлены;

4 балла – практическая работа сдана в срок, оформлена грамотно и самостоятельно, практически без ошибок.

- контрольная работа 0–20 баллов

0–5 баллов – задания выполнены частично, присутствуют значительные ошибки в решенных заданиях, подход к решению задач выбран неверно;

5–14 баллов – задания выполнены более чем наполовину, могут быть незначительные ошибки, прослеживается правильный подход к решению задач;

15–20 баллов – все задания выполнены, могут быть незначительные ошибки, в целом правильно и грамотно сформулирован подход к решению задач.

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Зачет с оценкой в третьем семестре проводится в письменной форме по билетам.

Билет состоит из двух частей и оценивается суммарно в 30 баллов.

Продолжительность зачета 1,5 часа.

Первая часть содержит один вопрос, проверяющий ИПК-1.1, ИПК-1.2.

Ответ на вопрос первой части даётся в развёрнутой форме.

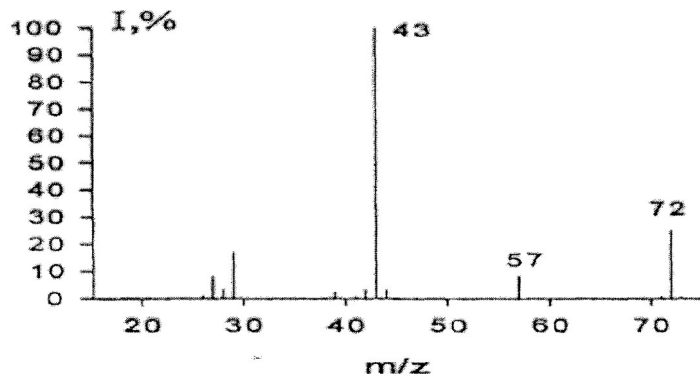
Вторая часть содержит два задания, проверяющее ИПК-1.3, и оформленные в виде практического задания. Приводится решение задачи и краткая интерпретация полученных результатов.

Примеры билетов

Билет 1.

Вопрос 1. Перечислите основные конструктивные элементы масс-спектрометра. Укажите разрешающую способность масс-спектрометра. Дайте определение понятию чувствительности и предела детектирования. Укажите динамический диапазон детектирования, точность измерения масс.

Задача 1. Идентифицируйте соединение, масс-спектр электронной ионизации которого приведен ниже:



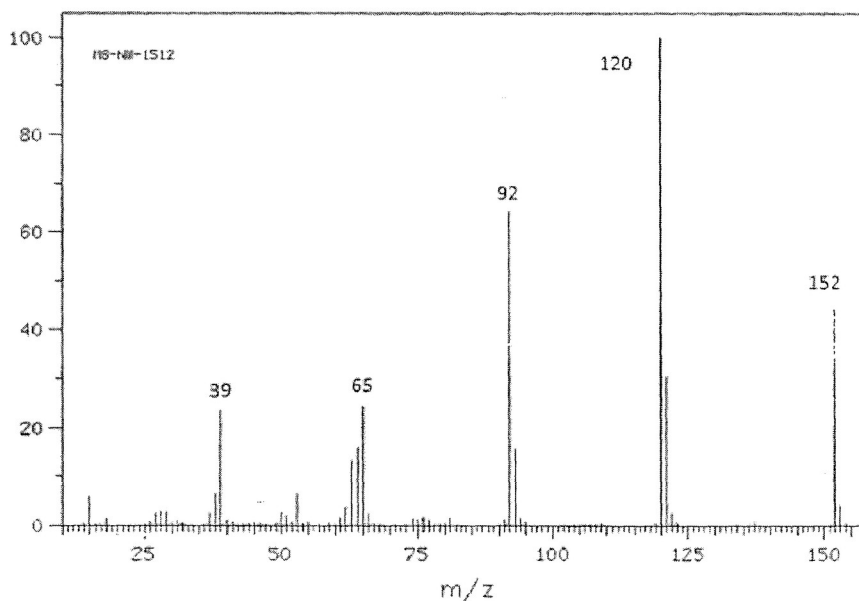
m/z	I, %	m/z	I, %
15	4,31	42	3,12
26	1,12	43	100
27	8,34	44	2,23
28	3,25	57	8,87
29	17,6	71	1,29
39	2,78	72	25,0
41	1,03	73	1,11

Задача 2. Рассчитать минимальную разрешающую способность масс-спектрометра для 100% разрешения триплета N_2 , CO, C_2H_4 , считая известными точные значения масс: $m(H) = 1,00782$, $m(C) = 12,00000$, $m(N) = 14,00307$, $m(O) = 15,99492$.

Билет 2.

Вопрос 1. Перечислите основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Опишите стабильность ионов и нейтральных частиц. Напишите правило выброса максимального алкильного радикала.

Задача 1. Интерпретируйте фрагментацию метилсалицилата, приводящую к появлению в масс-спектре электронной ионизации пиков, указанных на рисунке ниже. Составьте схему фрагментации.



Критерии оценивания

Результаты зачета с оценкой оцениваются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он грамотно и по существу излагает материал, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Тестирование (ИПК-1.1, ИПК-1.2, ИПК-1.3)

1. Метод электронного удара имеет другое название

- 1) метод электронной доставки
- 2) метод электронной ионизации
- 3) метод поверхностной ионизации

2. В методе вэжх/мс, масс-спектрометр расположен

- 1) на входе в хроматографическую колонку
- 2) на выходе из хроматографической колонки
- 3) в термостате

3. Метод масс-спектрометрии появился

- 1) в конце XIX века
- 2) в начале XX века
- 3) в середине XX века

4. Разрешение масс-спектрометрии – это

- 1) способность измерить количество ионов
- 2) количественная мера, характеризующая способность анализатора разделять ионы с соседними массами
- 3) способность разделить некоторые ионы

5. Необходимым условием работы основных узлов прибора масс-спектрометра является

- 1) низкое давление
- 2) высокое давление
- 3) отсутствие света

6. Динамический диапазон масс-спектрометра составляет

- 1) 1-2 порядка
- 2) 2-3 порядка
- 3) 3-4 порядка

Выберите несколько правильных ответов

7. При использовании гибридного метода гжх/мс, по сравнению с метода гжх, достигается

- 1) повышение чувствительности
- 2) повышение достоверности
- 3) уменьшение времени анализа

8. Сочетания метода масс-спектрометрии с хроматографическим методом позволяет, в сравнении с методом масс-спектрометрия

- 1) снизить уровень шума, критерия (сигнал – шум)
- 2) повысить достоверность результатов
- 3) уменьшить стоимость анализа

9. Основными техническими характеристиками метода мс являются:

- 1) специфичность
- 2) разрешение
- 3) чувствительность

10. Для ионизации сложных биологических молекул в методе масс-спектрометрии используют

- 1) метод электронного удара
- 2) метод ионизации в электроспрее
- 3) метод ионизации лазерной десорбцией

Ответы к тесту определения остаточный знаний	
№	ответ
1	2
2	2
3	2
4	2
5	4
6	4
7	1,2
8	1,2
9	2,3,4
10	2,3,4

Информация о разработчиках

Селихова Наталья Юрьевна, кандидат химических наук, лаборатория органического синтеза ХФ ТГУ, старший научный сотрудник.