

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

Рабочая программа дисциплины

**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

Томск – 2024

## **1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины:**

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. Задачи освоения дисциплины**

– Сформировать представление о предмете масс-спектрометрия органических соединений, современном состоянии и путях развития масс-спектрометрии и связи её с другими науками.

– Получить знания и навыки, необходимые для эффективного использования современных масс-спектрометрических приборов для решения разнообразных задач.

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

– Владеть методами проведения масс-спектрометрического анализа и навыками грамотной интерпретации масс-спектров основных классов органических соединений с использованием основных закономерностей масс-спектрального распада.

– Сформировать представления о возможности практического применения метода масс-спектрометрии в различных областях человеческой деятельности.

## **3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы.

## **4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине**

Семестр 3, зачет с оценкой.

## 5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «Строение вещества», «Физико-химические методы анализа», «Хроматографические методы».

## 6. Язык реализации

Русский

## 7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часа, из которых:

– лекции: 12 ч.;

– практические занятия: 20 ч.;

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

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

Тема 1. Основы масс-спектрометрии

Лекция: Введение. Общие понятия и определения. История создания масс-спектрометрии. Блок-схема масс-спектрометра. Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, разрешающая способность, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные).

Практика: Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру низкого разрешения. Метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону. Установление строения органических соединений: метод функциональных групп, метод характеристических значений  $m/z$ .

Тема 2. Методы ионизации

Лекция: Системы ввода образца в ионный источник масс-спектрометра. Различные методы ионизации (электронный удар, химическая ионизация, химическая ионизация при атмосферном давлении, индуктивно-связанная плазма). Методы ионизации соединений с высокой молекулярной массой и высокомолекулярных соединений (полевая десорбция (FD), химическая ионизация (CI), электроспрей (ES), матричная лазерная десорбционная ионизация (MALDI)).

Практика: Альтернативные методы ионизации органических соединений.

Лабораторная работа: Устройство масс-спектрометра. Источники ионизации ESI, APPI.

Тема 3. Методы разделения и регистрации ионов

Лекция: Принцип работы магнитного секторного масс-спектрометра, двухфокусного секторного масс-спектрометра. Квадрупольный анализатор. Ионная ловушка и времяпролетный анализатор высокого разрешения. Детектирование ионов. Принцип работы электронного умножителя и фотоумножителя.

Практика: Определение элементного состава ионов на основании изотопных пиков. Расчет изотопной чистоты соединений. Интерпретация масс-спектров, полученных с использованием разных методов ионизации.

Лабораторная работа: Получение масс-спектров разных классов органических соединений.

Тема 4. Практические основы интерпретации масс-спектров

Лекция: Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам.

Основные направления фрагментации различных классов органических соединений под электронным ударом (углеводородов и их галогенпроизводных, спиртов, фенолов, простых эфиров, альдегидов, кетонов, аминов, карбоновых кислот и их производных).

Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом: простой разрыв связей ( $\alpha$ -разрыв, бензильный и аллильный разрывы), ретро-реакция Дильса-Альдера, перегруппировка Мак-Лафферти, скелетные перегруппировки.

Практика: Практические основы интерпретации масс-спектров. Фрагментарные ионы. Гомологические серии ионов. Выбросы простейших нейтральных частиц. Наиболее интенсивные пики в спектре. Схема фрагментации.

Лабораторная работа: Установление строения органических соединений. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

Тема 5. Комбинация масс-спектрометра с системами предварительного разделения смесей веществ

Лекция: Хромато-масс-спектрометрия. Системы ввода пробы в масс-спектрометр для газовой и жидкостной хроматографии. Жидкостная хроматография-масс-спектрометрия. Ленточный транспортер. Прямой ввод жидкости. Поток частиц. Термораспыление.

Практика: Количественный анализ с помощью хромато-масс-спектрометрии. Методы внешнего и внутреннего стандартов.

Лабораторная работа: Установление строения органических соединений. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

Тема 6. Основные направления применения масс-спектрометрии

Лекция: Основные направления применения масс-спектрометрии

Практика: Тандемная масс-спектрометрия. Получение спектра дочерних и родительских ионов. Съемка образца в режиме мониторинга выбранной реакции (SRM) и мониторинга множественных реакций (MRM), как способ повышения чувствительности и селективности анализа микропримесей.

Лабораторная работа: Установление строения органических соединений. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

0

## 9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведению устного опроса, решения задач, выполнения отчета по практической работе, выполнения контрольной работы и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

## 10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

**Зачет с оценкой** проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит теоретический вопрос и две задачи. Продолжительность зачета 1,5 часа.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

## 11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» – <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=00000>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (<https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>).

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Лебедев А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии / А. Т. Лебедев. — 2-е изд. — М.: Техносфера, 2015. — 702 с. — ISBN 978-5-94836-409-4. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://www-iprbookshop-ru.ez.lib.tsu.ru/84686.html>

– Экман Р. Масс-спектрометрия: аппаратура, толкование и приложения : [базовый курс по основам масс-спектрометрии : от теоретических основ до тонкостей применения метода] / Р. Экман, Е. Зильберинг, Э. Вестман-Бринкмальм, А. Край ; пер. с англ. П. С. Метальникова ; под ред. А. Т. Лебедева. – М.: Техносфера, 2013. - 352 с.

– Хмельницкий Р. А. Хромато-масс-спектрометрия / Р. А. Хмельницкий, Е. С. Бродский. - М. : Химия, 1984. - 210, [6] с.: ил. - ( Методы аналитической химии ) . URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000138516/000138516.djvu>

б) дополнительная литература:

– Лебедев А. Т. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды / А. Т. Лебедев. — Москва : Техносфера, 2013. — 632 с. — ISBN 978-5-94836-363-9. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://www-iprbookshop-ru.ez.lib.tsu.ru/31868.html>

– Лаваньини И. Количественные методы в масс-спектрометрии / И. Лаваньини, Ф. Маньо, Р. Сералья, П. Тральди ; пер. с англ. Ю. О. Каратассо под ред. Е. Н. Николаева. – М.: Техносфера, 2008. - 175 с.

– Джонстон Р. Руководство по масс-спектрометрии для химиков-органиков / Р. Джонстон; Пер. с англ. З. Е. Самойловой, Ю. Б. Гребенщикова; Под ред. Р. Г. Костяновского. - М. : Мир, 1975. – 236 с.

– Будзикович Г. Интерпретация масс-спектров органических соединений / Г. Будзикович, К. Джерасси, Д. Уильямс ; пер. с англ. В. И. Зарецкого, В. А. Пучкова ; под ред. Н. С. Вульфсона. - М. : Мир, 1966. - 324 с.

– Чепмен Д. Р. Практическая органическая масс-спектрометрия / Дж. Чепмен; Перевод с англ. А. Т. Лебедева. - М. : Мир, 1988. - 216 с.

в) ресурсы сети Интернет:

– American Society for Mass Spectrometry - <https://www.asms.org/>

– Journal of mass spectrometry <https://analyticalsciencejournals.onlinelibrary.wiley.com/journal/10969888c>

– Всероссийское Масс-спектрометрическое Общество - <http://www.vmsso.ru/>

– Журнал Всероссийского масс-спектрометрического общества «МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ» - <http://mass-spektrometria.ru/>

## 13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных:

– Mass Spectrometry Data Center, NIST – <https://chemdata.nist.gov/>

– European MassBank – <https://massbank.eu/MassBank/>

#### **14. Материально-техническое обеспечение**

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

#### **15. Информация о разработчиках**

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