

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по УР

проф. А. В. Бурмистров



« 14 » 09 2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

по дисциплине Б1.В.ДВ.11 2 Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии

Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология»

Профиль подготовки Химическая технология органических веществ

Квалификация (степень) выпускника бакалавр

Программа подготовки академ. бакалавриат

Форма обучения очная

Институт, факультет Институт нефти, химии и нанотехнологии, факультет нефти и нефтехимии

Кафедра-разработчик рабочей программы - Технология основного органического и нефтехимического синтеза

Курс, семестр 3, 6

	Часы	Зачетные единицы
Лекции	18	0,5
Практические занятия		
Семинарские занятия		
Лабораторные занятия	27	0,75
Самостоятельная работа	72	2
Форма аттестации Экзамен	27	0,75
Всего	144	4

Казань, 2018г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования № 1005 от 11 августа 2016 г по направлению 18.03.01 «Химическая технология».
для профиля «Химическая технология органических веществ», на основании учебного плана набора обучающихся 2018 года приема

Типовая программа дисциплины Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии отсутствует

Разработчик программы:
доцент _____



Мусин Р.З.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ТООНС протокол от 01.09.2018. г. №1

Зав. кафедрой _____



С.В.Бухаров

УТВЕРЖДЕНО

Протокол заседания методической комиссии факультета нефти и нефтехимии от 07.09.2018 г. № 1.

Председатель комиссии, профессор _____



Н.Ю.Башкирцева

Начальник УМЦ _____



Л.А. Китаева

1. Цели освоения дисциплины

- а) приобретение опыта в планировании и практическом выполнении исследований в области определения качества продукции нефтехимического синтеза.
- б) обучение практических основ хроматографических методов установления состава многокомпонентных смесей.
- в) раскрытие сущности физико-химических процессов, происходящих при использовании различных методов ионизации с последующим применением их при идентификации сырья и продукции химических производств.
- г) приобретение навыков практического использования современной приборной базы для установления состава продукции нефтехимического синтеза.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина **Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии** относится к вариативной части дисциплин ООП и формирует у бакалавров по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология» по профилю «Химическая технология органических веществ» набор знаний, умений, навыков и компетенций.

Для успешного освоения дисциплины **Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии** бакалавр по профилю подготовки «Химическая технология органических веществ» должен освоить материал предшествующих дисциплин:

- а) Б1.Б.8 - *Физика*
- б) Б1.Б.12- *Физическая химия*
- в) Б1.Б.11- *Органическая химия*

Знания, полученные при изучении дисциплины **«Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии»** могут быть использованы при прохождении преддипломной практики, при выполнении выпускных квалификационных работ, могут быть использованы в научно-исследовательской и производственно-технологической деятельности по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология» по профилю «Химическая технология органических веществ»

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

ПК-10-способностью проводить анализ сырья, материалов и готовой продукции, осуществлять оценку результатов анализа

ПК-18 - готовностью использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности

ПК-19 -готовностью использовать знания основных физических теорий для решения возникающих физических задач, самостоятельного приобретения физических знаний, для понимания принципов работы приборов и устройств, в том числе выходящих за пределы компетентности конкретного направления

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- 1) Знать:
 - методические основы планирования масс-спектрометрического и хроматографического эксперимента для практической его реализации исследований в области органического и нефтехимического синтеза
 - основы физических процессов ионизации в источниках ионов масс-спектрометров и возникающие при этом типы ионов
 - основы процессов физико-химических разделения веществ в хроматографии

- методы детектирования используемые в газовой и жидкостной хроматографии
- основные особенности блок-схем современных хроматографов и масс-спектрометров
- пределы обнаружения компонентов при использовании хроматографических и масс-спектрометрических методов
- основы качественного и количественного анализа метода высокоэффективной жидкостной хроматографии

2) Уметь:

- выполнять экспериментальные процедуры хроматографического и масс-спектрометрического анализа
- определять преимущества и недостатки методов по основным техническим показателям современного хроматографического и масс-спектрометрического оборудования
- модернизировать известные хроматографические и масс-спектрометрические методики для решения конкретных аналитических задач
- пользоваться учебной, научной и справочной литературой в области хроматографических и масс-спектрометрических методов исследования состава сложных смесей.
- пользоваться набором компьютерных программ обработки масс-спектрометрических и хроматографических данных.

3) Владеть:

- экспериментальными и компьютерными методиками расчета данных хроматографического и масс-спектрометрического анализа органических соединений, продуктов нефтехимического синтеза и др. соединений

4. Структура и содержание дисциплины Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы (в часах)				Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам
			Лекция	(Практическое занятие)	Лабораторные работы	СРС	
1	Тема 1. История развития хроматографического метода анализа. Основные понятия и определения.	6	2			4	Контрольные вопросы
2	Тема 2 Теоретические основы хроматографии. Основные характеристики хроматографического	6	3			14	Контрольная работа

	процесса.						
3	Тема 3. Газо-адсорбционная и газо-жидкостная хроматографии	6	2		8	14	
4	Тема 4. Жидкостная хроматография.	6	4		6	15	
5	Тема 5. Хромато- масс-спектрометрия	6	7		13	25	
	ИТОГО:		18		27	72	Экзамен

5. Содержание лекционных занятий по темам

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лекционного занятия	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Тема 1. История развития хроматографического метода анализа. Основные понятия и определения.	2	Цели, объем и содержание курса Основные понятия и определения хроматографического метода	Классификация хроматографических методов по методике проведения эксперимента, по составу фаз и механизму разделения. Характеристика неподвижных и подвижных фаз в хроматографии. Классификация сорбентов.	<i>ПК-10, ПК-18, ПК-19</i>
	Тема 2. Теоретические основы хроматографии. Основные характеристики хроматографического процесса.	3	Теоретические основы хроматографии.	Коэффициент распределения, удерживаемый объем и время удерживания, коэффициент емкости, селективность и эффективность разделения. Разрешение в хроматографии, концепция теоретических тарелок. Изотермы сорбции, зависимость формы пика от вида изотермы сорбции. Хроматографические размывания («хвосты»). Факторы, влияющие на размывание зон (вихревая диффузия, молекулярная диффузия, сопротивление массопередачи	<i>ПК-10, ПК-18, ПК-19</i>

				<p>в неподвижной и подвижной фазах).</p> <p>Выбор параметров хроматографического определения. Идентификация веществ, количественный анализ, методы количественного анализа.</p>	
	Тема 3. Газо-адсорбционная и газо-жидкостная хроматографии.	2	Основы газо-адсорбционная и газо-жидкостная хроматографии	<p>Аппаратура, подвижные, неподвижные фазы. Колонки и техника их заполнения, термостаты, газы-носители, сорбенты с химически привитыми органическими фазами.</p>	<i>ПК-10, ПК-18, ПК-19</i>
	Тема 4. Жидкостная хроматография.	4	Принципы метода и решаемые задачи высокоэффективной жидкостной хроматографии.	<p>Сущность метода, особенности механизма удерживания молекул. Механизмы разделения в жидкостной хроматографии: адсорбционный, распределительный, ионообменный. Практическое применение. Ионная хроматография. Принцип метода, решаемые задачи высокоэффективной жидкостной хроматографии. Сорбенты в ВЭЖХ. Силикагель и его структура. Оксид алюминия и другие сорбенты. Подвижная фаза, элюотропные ряды. Изократическое и градиентное элюирование. Нормально-фазовая и обращенно-фазовая варианты жидкостной хроматографии.</p> <p>Ион-парная хроматография и ее практическое применение. Лигандообменная хроматография и ее практическое применение.</p> <p>Жидкость-жидкостная хроматография и ее практическое применение.</p>	<i>ПК-10, ПК-18, ПК-19</i>
	Тема 5. Хромато-масс-спектрометрия	7	Сочетание методов хроматографии и масс-	<p>Введение в масс-спектрометрию. Физические и химические принципы метода. Типы масс-спектрометров.</p>	<i>ПК-10, ПК-18, ПК-19</i>

			спектрометрии в один метод - хромато-масс-спектрометрия	Классификация Система ввода образца. Хромато-масс-спектрометрия (GC/MS). Жидкостная хроматография-масс-спектрометрия (LC/MS). Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Практические основы интерпретации масс-спектров. Основные направления фрагментации важнейших классов органических соединений. Количественный масс-спектрометрический анализ.	
--	--	--	---	--	--

6. Содержание семинарских, практических занятий .

Учебным планом профиля Химическая технология органических веществ проведение семинарских и практических занятий по дисциплине "Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии" не предусмотрено

7. Содержание лабораторных занятий.

Учебным планом подготовки бакалавров предусмотрено проведение лабораторных занятий по дисциплине «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии»

Цель проведения лабораторных занятий – освоение лекционного материала, касающегося вопросов, связанных с грамотным выполнением основных приемов количественного и качественного анализа методами хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии с использованием компьютерной техники.

Содержание лабораторных занятий

№ /п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лабораторной работы	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Тема 3. Газо-адсорбционная и газожидкостная хроматографии Лабораторная работа №1	8	Установления строения органических соединений с помощью газожидкостной хроматографии	Снятие хроматограмм смесей искусственных смесей низших спиртов, их расшифровка и установление структуры органического соединения. Оформление результатов работы	ПК-10, ПК-18, ПК-19
2	Тема 4. Жидкостная хроматография.	6	Установления строения органических соединений с помощью жидкостной хроматографии	Анализ смеси органических соединений с использованием жидкостной хроматографии органических соединений. Расшифровка хроматограммы и идентификация органических соединений. Оформление результатов работы	ПК-10, ПК-18, ПК-19

3	Тема 5. Хромато-масс-спектрометрия	6	Установления строения органических соединений с помощью хромато-масс-спектрометрии	Получение масс-спектров спектров индивидуальных органических соединений алифатического и ароматического рядов в режиме хромато-масс-спектрометрии. Расшифровка масс-спектров и установление структуры органического соединения. Оформление результатов работы	ПК-10, ПК-18, ПК-19
	Тема 5. Хромато-масс-спектрометрия.	7	Идентификация продуктов нефтехимического синтеза методом хромато-масс-спектрометрии	Анализ образцов автомобильных бензинов с использованием хромато-масс-спектрометрии. Компьютерная обработка хроматограмм и масс-спектров органических соединений. Оформление результатов работы	ПК-10, ПК-18, ПК-19

8. Самостоятельная работа бакалавра

Планируемое содержание самостоятельной работы бакалавра при изучении дисциплины «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии» представлено в таблице

Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС	Формируемые компетенции
Тема 1. История развития хроматографического метода анализа. Основные понятия и определения	4	Изучение лекционного материала и рекомендуемой литературы; подготовка к лабораторным работам и оформления отчетов	ПК-10, ПК-18, ПК-19
Тема 2. Теоретические основы хроматографии. Основные характеристики хроматографического процесса. Коэффициент распределения, удерживаемый объем и время удерживания, коэффициент емкости, селективность и эффективность, коэффициент разделения. Разрешение в хроматографии, концепция теоретических тарелок. Изотермы сорбции, зависимость	14	Изучение лекционного материала и рекомендуемой литературы; подготовка к лабораторным работам и оформления отчетов	ПК-10, ПК-18, ПК-19

<p>формы пика от вида изотермы сорбции.</p> <p>Хроматографические размывания («хвосты»). Факторы, влияющие на размывание зон (вихревая диффузия, молекулярная диффузия, сопротивление массопередачи в неподвижной и подвижной фазах).</p> <p>Выбор параметров хроматографического определения. Идентификация веществ, количественный анализ, методы количественного анализа.</p>			
<p>Тема 3</p> <p>Газо-адсорбционная и газо-жидкостная хроматографии. Аппаратура, подвижные, неподвижные фазы. Колонки и техника их заполнения, термостаты, газы-носители, сорбенты с химически привитыми органическими фазами</p>	14	Изучение лекционного материала и рекомендуемой литературы; подготовка к лабораторным работам и оформления отчетов	<i>ПК-10, ПК-18, ПК-19</i>
<p>Тема 4</p> <p>Жидкостная хроматография. Сущность метода, особенности механизма удерживания молекул. Механизмы разделения в жидкостной хроматографии: адсорбционный, распределительный, ионообменный. Практическое применение.</p> <p>Механизмы разделения в жидкостной хроматографии: адсорбционный, распределительный, ионообменный. Практическое применение. Ионная хроматография. Принцип метода, решаемые задачи высокоэффективной хроматографией</p>	15	Изучение лекционного материала и рекомендуемой литературы; подготовка к лабораторным работам и оформления отчетов	<i>ПК-10, ПК-18, ПК-19</i>
<p>Тема 5</p> <p>Содержание метода масс-спектрометрии</p> <p>Запись масс-спектра. Масс-спектры отдельных классов органических соединений. Типы ионов. Основные направления фрагментации.</p> <p>Типы масс-спектрометров. Классификация. Сравнение различных схем.</p> <p>Масс-спектрометрия в анализе следов органических веществ. Система ввода образца.</p> <p>Хроматомасс-спектрометрия (GC/MS). Жидкостная хроматография-масс-спектрометрия (LC/MS).</p>	25	Изучение лекционного материала и рекомендуемой литературы; подготовка к лабораторным работам и оформления отчетов	<i>ПК-10, ПК-18, ПК-19</i>

Капиллярный электрофорез-масс-спектрометрия (CE/MS). Физические основы процесса масс-спектрометрического распада. Разделение и регистрация ионов. Магнитный секторный масс-спектрометр. Масс-спектрометрия высокого разрешения.			
---	--	--	--

9. Использование рейтинговой системы оценки знаний.

При оценке результатов деятельности студентов в рамках дисциплины «**Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии**» используется рейтинговая система. Рейтинговая оценка формируется на основании текущего и промежуточного контроля. Максимальное и минимальное количество баллов по различным видам учебной работы описано в Положении о рейтинговой системе.

При изучении указанной дисциплины предусматривается выполнение 4 лабораторные работы и 1 контрольная работа. За эти работы студент может получить максимальное количество баллов – 60 (10 баллов за работу). В результате максимальный текущий рейтинг составит 60 баллов. В итоге максимальный рейтинг за изучение дисциплины составляет 100 баллов. За эти контрольные точки студент может получить минимальное и максимальное количество баллов (см. таблицу).

<i>Оценочные средства</i>	<i>Кол-во</i>	<i>Min, баллов</i>	<i>Max, баллов</i>
<i>Лабораторная работа №1</i>	<i>1</i>	<i>6</i>	<i>10</i>
<i>Лабораторная работа №2</i>	<i>1</i>	<i>6</i>	<i>10</i>
<i>Лабораторная работа №3</i>	<i>1</i>	<i>6</i>	<i>10</i>
<i>Лабораторная работа №4</i>	<i>1</i>	<i>6</i>	<i>10</i>
<i>Контрольная работа</i>	<i>1</i>	<i>12</i>	<i>20</i>
<i>Экзамен</i>		<i>24</i>	<i>40</i>
<i>Итого:</i>		<i>60</i>	<i>100</i>

10. -Информационно методическое обеспечение дисциплины «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии»

10.1 Основная литература

При изучении дисциплины «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии» в качестве основных источников информации, рекомендуется использовать следующую литературу:

Основные источники информации	Кол-во экз.
1. Кузнецов И.Н. Научное исследование: Методика проведения и оформление.-2-е изд., перераб. и доп.- М.: Дашков и К, 2006.- 406 с.	50 экз. в УНИЦ КНИТУ
2. Органическая химия [Электронный ресурс] учеб. пособ. Для вузов: в 3т.Т.II/ В.Ф. Травень.-3-е изд.(эл.) М.:БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.-368с. (Учебник для высшей школы)	ЭБС «Znanium.com»: http://znanium.com/bookread2.php?book=485774# Доступ из любой точки интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ
4. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика: учеб.пособ./под редакцией проф.Ф.Ф. Литвина – М.:ИНФРА-М, 2013.- 263с. (Высшее образование: Бакалавриат)	ЭБС «Znanium.com»: http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=352873 . Доступ из любой точки интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ
5. Валова (Копылова), В. Д. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа [Электронный ресурс] : Практикум / В. Д. Валова (Копылова), Е. И. Паршина. - М. : Издательско-торговая корпорация «Дашков и К°», 2013. - 200 с.	ЭБС «Znanium.com»: http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=430507 Доступ из любой точки интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ

10.2 Дополнительная литература

В качестве дополнительных источников информации, рекомендуется использовать следующую литературу:

Дополнительные источники информации	Кол-во экз.
1 Кунакова Р.В., Зайнуллин А.К., Куковина О.С. Применение спектроскопии в органической химии. М.: Химия, 2007.- 272с.	1 экз. в УНИЦ КНИТУ
2. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа: шпаргалка. — М. : РИОР. — 176 с.	ЭБС «Znanium.com»: http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=614848 Доступ из любой точки интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ
1. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003. – 494 с.	100 экз. УНИЦ КНИТУ

10.3 Электронные источники информации

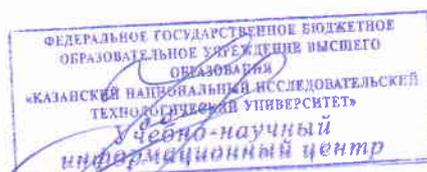
При изучении дисциплины «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии» в качестве электронных источников информации, рекомендуется использовать следующие источники:

1. Научная Электронная Библиотека (НЭБ) – Режим доступа:<http://elibrary.ru>

2. ЭБС «Юрайт» – Режим доступа: <http://www.biblio-online.ru>
3. ЭБС «РУКОНТ» – Режим доступа: <http://rucont.ru>
4. ЭБС «IPRbooks» – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru>
5. ЭБС «Лань» – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/books/>
6. ЭБС «КнигаФонд» – Режим доступа: www.knigafund.ru
7. ЭБС «БиблиоТех» – Режим доступа: <https://kstu.bibliotech.ru>
8. ЭБС «Znanium.com» – Режим доступа: <http://znanium.com/books/>

Согласовано:

Зав. Сектором комплектования



Усольцева И.И.

11. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся и итоговой (государственной итоговой) аттестации разрабатываются согласно положению о Фондах оценочных средств, рассматриваются как составная часть рабочей программы и оформляются отдельным документом.

12. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

В качестве материально-технического обеспечения дисциплины «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии» при проведении лабораторных занятий используется оборудование: Хромато-масс-спектрометр DFS Thermo Electron Corporation (ИОФХ им. А.Е.Арбузова КНИЦ РАН), жидкостной хроматограф Agilent Technologies 1260 Infinity («Комплексной лаборатории по изучению структуры и состава веществ» КНИТУ), хромато-масс-спектрометр Хроматэк-Кристалл-ГХ-МС DSQ (Кафедра ТООНС КНИТУ)

Бакалавры обеспечиваются руководством по эксплуатации оборудования, и методическими указаниями по оформлению отчетов.

13. Образовательные технологии

Согласно учебному плану предусмотрено 17 часов интерактивной формы обучения. При изучении дисциплины «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии» лабораторные занятия проводятся на кафедре ТООНС. При изучении дисциплины «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии» в качестве средств визуализации информации используется ознакомление с жидкостным хроматографом и хромато-масс-спектрометром. В рамках учебного курса предусматривается проведение мастер-классов ведущими специалистами ИОФХ им. А.Е.Арбузова КНИЦ РАН. Количество интерактивных часов составляет 17

Содержание

1	Цели освоения дисциплины	3
2	Место дисциплины в структуре образовательной программы	3
3	Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины	3
4	Структура и содержание дисциплины «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии»	4
5	Содержание лекционных занятий по темам	5
6	Содержание семинарских, практических занятий	7
7	Содержание лабораторных занятий дисциплины	7
8	Самостоятельная работа бакалавра	8
9	Использование рейтинговой системы оценки знаний	10
10	Информационно методическое обеспечение дисциплины	11
11	Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины	12
12	Материально – техническое обеспечение дисциплины	12
13	Образовательные технологии	12
	Содержание	13

Лист переутверждения рабочей программы

Рабочая программа по дисциплине Б.1.В.ДВ.11.2 «Основы хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии»

По направлению 18.03.01 – «Химическая технология»

для профиля подготовки «Химическая технология органических веществ»

для набора обучающихся 2019 года

пересмотрена на заседании кафедры «Технологии основного органического и нефтехимического синтеза»

№ п/п	Дата переутверждения РП	Наличие изменений	Наличие изменений в списке литературы	Подпись разработчика РП	Подпись заведующего кафедрой	Подпись начальника УМЦ/ОМг/ОАиД
1.	протокол заседания кафедры №12 от 02.07.2019	Нет/есть*	Нет/есть			

* Внесены дополнения в пункт Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля):

в учебном процессе используется лицензированное свободно распространяемое программное обеспечение - MS Office 2007 Russian

Пункт Профессиональные базы данных и информационные справочные системы: elibrary.ru