

Розробники: Алексеев Сергій Олександрович, к.х.н., доц., доцент кафедри аналітичної хімії,
Лелюшок Сергій Олександрович, к.х.н., доц., доцент кафедри аналітичної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри аналітичної хімії

 Оксана ТАНАНАЙКО

Протокол № 12 від «22» червня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «29» червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

«_____» _____ 2022 року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – дати студентам поняття про можливості використання мас-спектрометричного та рентген-флуоресцентного методів аналізу для розв'язання широкого діапазону задач, пов'язаних з аналізом об'єктів довкілля, біомедичними дослідженнями та сучасними технологічними процесами.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни. Знати основи неорганічної, органічної та фізичної хімії; хімічних та інструментальних методів кількісного аналізу; курсу «фізичні методи дослідження у хімії». Успішне опанування базових курсів загальної хімії, фізики та математики на рівні бакалаврату.

3. Анотація навчальної дисципліни. В рамках курсу «Мас-спектрометрія та рентген-флуоресценція в аналізі» вивчаються фізико-хімічні основи методу мас-спектрометрії (МС) та його поєднання з попередніми методами розділення: газовою та рідинною хроматографією. Також вивчаються підходи тандемної мас-спектрометрії, мас-спектрометрії з лазерною десорбцією-іонізацією, мас-спектрометрія ізотопних відношень та мас-спектрометрії з індуктивно-зв'язаною плазмою. Вивчаються основи рентген-флуоресцентного спектрального аналізу (РФСА), зокрема, принципи формування аналітичного сигналу та способи проведення якісного і кількісного аналізу цим методом. Розглядаються особливості та практичні нюанси застосування вказаних методів для розв'язання широкого кола хіміко-аналітичних задач: аналіз об'єктів довкілля, біомедичні дослідження та контроль сучасних технологічних процесів тощо.

4. Завдання: розвиток теоретичних уявлень студентів про мас-спектрометричні та рентген-флуоресцентний методи аналізу та супутні методи розділення. Формування у студентів практичних навичок аналізу рентгенівських та мас-спектрів, а також, мас-хроматографічних та рентген-флуоресцентних даних, розуміння можливостей та обмежень різних методів МС та РФСА, вміння визначати придатність того чи іншого методу під конкретну задачу.

Вивчення дисципліни сприяє формуванню у студентів низки компетентностей, зокрема загальних (ЗК) і спеціальних (СК), таких як: здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК2), здатність до адаптації та дії в новій ситуації (ЗК4), прагнення до збереження навколишнього середовища (ЗК9); здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії (СК1), здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії (СК4), здатність оцінювати ризики (СК6), здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані (СК8).

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	Знати фізико-хімічні основи процесів іонізації і розділення іонів за масою; процеси утворення первинного і вторинного рентгенівського випромінювання, а також відповідне апаратне оформлення.	Лекції, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, КР	10
1.2	Знати які аналіти та методи іонізації сумісні з методом газової хроматографії – мас-спектрометрії (МС) ; яку хіміко-аналітичну інформацію можна отримати цим методом; як впливають параметри рентгенівської трубки та проби на формування аналітичного сигналу.	Лекції, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, КР	10
1.3	Знати принцип якісного рентгенфлуоресцентного аналізу; особливості хіміко-аналітичних задач, які вимагають застосування методів рідинної хроматографії – МС і тандемної МС.	Лекції, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, КР	10
1.4	Знати базові принципи методів температурно-десорбційної МС, лазерної десорбційної МС, МС з індуктивно-зв'язаною плазмою, МС вторинних іонів та МС ізотопних відношень; принцип кількісного рентгенфлуоресцентного аналізу. Розуміти хіміко-аналітичну інформацію, яку можна отримати цими методами та галузі їх застосування.	Лекції, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, КР	10
2. Уміння				
2.1	Інтерпретувати мас-спектри органічних молекул і рентгенівські спектри проб та передбачати структуру сполук за спектром.	Лекції, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, КР	15
2.2	Передбачати методику/метод, які придатні для аналізу того чи іншого об'єкту і необхідну для цього попередню пробопідготовку.	Лекції, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, КР	15

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
2.3	Користуватися програмним забезпеченням для аналізу мас-хроматограм, базами мас-спектрів національного інституту стандартів і технології США та аналізу рентген-флуоресцентних спектрів.	Лекції, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, КР	15
3. Комунікація				
3.1	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями та використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для збору, аналізу, обробки та інтерпретації даних у галузях мас-спектрометрії та рентгенівської флуоресценції.	Лекції, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, КР	10
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Уміти самостійно виконувати домашні завдання, дотримуватися правил наукової етики та доброчесності, критично аналізувати отриману інформацію у галузі галузях мас-спектрометрії та рентгенівської флуоресценції.	Лекції, самостійна робота	Перевірка завдань самостійної роботи, КР	5

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):

Результати навчання дисципліни	Програмні результати навчання									
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	3.1	4.1	
Р06 Розуміти періодичний закон та періодичну систему елементів, описувати, пояснювати та передбачати властивості хімічних елементів та сполук на їх основі.	+	+			+	+				
Р07 Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атомів, молекул та хімічних зв'язків.	+	+								
Р15 Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем і процесів, а також обробки експериментальних даних.			+	+	+		+			

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни									
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	3.1	4.1	
P18 Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.								+	+	
P21 Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.								+	+	

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів /36 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: РН 1.1, 3.1– 20/12 балів.
2. Контрольна робота №2: РН 1.2, 2.1, 2.2, 4.1 – 20/12 балів.
3. Контрольна робота №3: РН 1.3, 2.2 – 20/12 балів.

Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **40 балів /24 бали***.

Результати навчання, які будуть оцінюватись: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 20 тестових питань – по 2 бали кожне і 4 відкриті питання (розгорнута письмова відповідь) – по 4 бали кожне і 1 задача – 4 бали.

*Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за екзамен не може бути меншою ніж 24 бали.

Студент допускається до іспиту, якщо впродовж семестру він:

набрав не менше, ніж **36 балів**;

написав контрольні роботи і вчасно виконав завдання самостійної роботи.

7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: після проходження теми 1;

Контрольна робота №2: після проходження теми 2;

Контрольна робота №3: після проходження теми 3;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та самостійної роботи

№ теми	НАЗВА ТЕМИ	Кількість годин	
		Лекції	Самостійна робота
1	Фізикохімічні основи мас-спектрометрії та мас-спектрометричний аналіз летких сполук.	13	16
	Контрольна робота №1	1	
2	Мас-спектрометричний аналіз нелетких сполук, неорганічних матеріалів та природних об'єктів.	13	16
	Контрольна робота №2	1	
3	Рентген-флуоресцентна спектроскопія в аналізі.	13	16
	Контрольна робота №3	1	
Всього (90)		42	48

Загальний обсяг **90 год.**, у тому числі:

Лекцій – **42 год.**

Самостійна робота - **48 год.**

9. ЛІТЕРАТУРА

Основна:

1. О. В. Іщенко, С.В. Гайдай, О.А. Беда, Мас-спектрометрія., К.: ВПЦ "Київський університет". 2018. – 244 с.
2. A. Lebedev, Comprehensive Environmental Mass Spectrometry, ILM Publications, 2012.
3. J. H. Gross, Mass Spectrometry. A Textbook. 3rd Edition. Springer, 2017.
4. R. K. Boyd, C. Basic, R. A. Bethem, Trace Quantitative Analysis by Mass Spectrometry, John Wiley & Sons, 2008
5. К.М. Беліков, О.І. Юрченко Рентгенофлуоресцентний аналіз: Навчальний посібник, Харків, 2012, 52 с.

Додаткова:

6. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D.J. Kiemle, D. L. Bryce, Spectrometric Identification of Organic Compounds, 8th Edition, Wiley 2014.
7. J. T. Watson, O. D. Sparkman, Introduction to mass spectrometry, Wiley 2007.
8. J. Greaves, J. Roboz, Mass Spectrometry for the Novice, Taylor & Francis, 2014.