

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра аналітичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Заступник декана
з навчальної роботи
Хімічний факультет
Усенко Н.І.
2025 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

МАС-СПЕКТРОМЕТРИЧНІ МЕТОДИ АНАЛІЗУ ДЛЯ АСПІРАНТІВ
для здобувачів освітньо-наукового рівня
доктор філософії

галузь знань
спеціальність
освітній рівень
освітньо-наукова програма
вид дисципліни

10 Природничі науки
Е3 Хімія
третій, освітньо-науковий
Хімія
вибіркова

Форма навчання денна
Навчальний рік 2026/2027
Період навчання 2 рік
Кількість кредитів ECTS 4
Мова викладання, навчання
та оцінювання українська
Форма заключного контролю іспит

Викладачі: **Алексєєв Сергій Олександрович, д.х.н., професор кафедри аналітичної хімії**

Пролонговано: на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.
на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2025

Розробник: **Алексєєв Сергій Олександрович**, д.х.н., професор, доцент кафедри аналітичної хімії

Затверджено

Завідувач кафедри аналітичної хімії



О.Ю. Тананайко

(підпис)

Протокол № 7 від "3" квітня 2025 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 09 від 07 травня 2025 року

Голова науково-методичної комісії



Олександр ПОЇК

ВСТУП

1. Мета дисципліни – Метою навчальної дисципліни «Мас-спектрометричні методи аналізу для аспірантів» є формування у аспірантів сучасних поглядів на стан та розвиток мас-спектрометричних методів аналізу, глибокого розуміння їх теоретичних основ та надання інструментарію для вирішення широкого кола завдань, пов'язаних з аналізом об'єктів довкілля, біомедичними дослідженнями та сучасними технологічними процесами.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни. Аспірант повинен знати основи математики, фізики, загальної та неорганічної хімії, органічної хімії, фізичної хімії; хімічних та інструментальних методів кількісного аналізу; курсу «фізичні методи дослідження у хімії» в обсязі бакалаврських та магістерських навчальних програм хімічного факультету, а також мати базові навички роботи з ПК.

3. Анотація навчальної дисципліни. Дисципліна «Мас-спектрометричні методи аналізу для аспірантів» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. Вона забезпечує професійний розвиток аспіранта та спрямована на формування ефективного дослідника і викладача вищої школи, що глибоко розуміється на теоретичних основах та можливостях практичного використання мас-спектрометрії для вирішення реальних хіміко-аналітичних задач та передавати їх студентам та аудиторії. В рамках курсу 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. Розглядаються особливості та практичні нюанси застосування вказаних методів для розв'язання широкого кола хіміко-аналітичних задач: аналіз об'єктів довкілля, біомедичні дослідження, контроль сучасних технологічних процесів, тощо.

4. Завдання

Навчальний курс забезпечує загальнонаукову підготовку, спрямовану на формування системного наукового світогляду здобувачів освіти. Завдання курсу передбачають, що майбутні доктори філософії мають:

- опанувати основні теоретичні моделі, що лежать в основі процесів іонізації та розділення іонів за масою;
- знати, які аналіти та методи іонізації в МС сумісні з такими методами попереднього розділення речовин, як газова та рідинна хроматографія.
- знати базові принципи та галузі застосування методів тандемної МС, десорбційної МС, МС з індуктивно-зв'язаною плазмою, МС вторинних іонів та МС ізотопних відношень;
- вміти інтерпретувати мас-спектри органічних молекул і передбачати їх структуру за спектром;
- вміти користуватися базами мас-спектрів та програмним забезпеченням для їх аналізу

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 та розділення іонів за масою, а також відповідне апаратне оформлення.	Лекції, самостійна робота	Домашні завдання, ПСК	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.	Лекції, самостійна робота		10
1.3	Знати особливості хіміко-аналітичних задач, які вимагають застосування методів рідинної хроматографії – МС і тандемної МС.	Лекції, самостійна робота		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. Розуміти хіміко-аналітичну інформацію, яку можна отримати цими методами та галузі їх застосування.	Лекції, самостійна робота		10
2. Уміння				
2.1	Інтерпретувати мас-спектри органічних молекул і передбачати структуру сполук за спектром.	Лекції, практична робота, самостійна робота	Домашні завдання, ПСК	15
2.2	Передбачати методика/метод, які придатні для аналізу того чи іншого об'єкту і необхідну для цього попередню пробопідготовку.	Лекції, практична робота, самостійна робота		15
2.3	Користуватися програмним забезпеченням для аналізу мас-хроматограм, базами мас-спектрів національного інституту стандартів і технології США.	Лекції, практична робота, самостійна робота		15

3. Комунікація				
3.1	Застосування сучасних інформаційно-комунікаційних технологій для збору, аналізу, обробки та інтерпретації інформації щодо мас-спектрометричних методик аналізу та співвіднесення мас-спектру із будовою речовини	Лекції, практична робота, самостійна робота	Домашні завдання, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Уміти самостійно виконувати завдання, дотримуватися правил наукової етики та доброчесності, критично аналізувати отриману інформацію у галузі мас-спектрометричного аналізу	Лекції, практична робота, самостійна робота	Домашні завдання, ПсК	5
4.2	Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	Лекції, практична робота, самостійна робота		5

* підсумковий контроль **ПсК**

6. В результаті вивчення дисципліни аспірант отримає нові знання щодо основ мас-спектрометрії та її застосування в хімічному аналізі, познайомиться із широким арсеналом сучасних мас-спектрометричних методів, навчиться обирати найбільш ефективний метод аналізу у залежності від об'єкту та поставленої задачі. Ці знання та навички допоможуть аспіранту більш ефективно планувати, організовувати та проводити науково-дослідницьку та інноваційну роботу, кваліфіковано інтерпретувати отримані експериментальні дані та відображати результати наукових досліджень у наукових публікаціях.

7. Схема формування оцінки

7.1. Результати навчальної діяльності аспірантів оцінюються за 100-бальною шкалою.

Модульний контроль включає **2** змістові модуля і комплексний підсумковий модуль (іспит).

Впродовж навчання передбачається 2 практичні заняття

- семестрове оцінювання

Виконання двох домашніх робіт з аналізу мас-спектрів, мас-хроматограм та «модельних задач» із прогнозування застосовності мас-спектрометричних методів для аналізу реальних об'єктів

- підсумкове оцінювання – іспит.

Максимальна оцінка за семестр: **60 балів.**

Максимальна оцінка на іспиті: **40 балів.**

Максимальна загальна оцінка за курс: **100 балів.**

7.2. **Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):**

<i>Види робіт</i>		
	Змістовий модуль 1 (ЗМ1)	
Виконання домашнього завдання №1	<i>Min. – 18 балів</i>	<i>Max. – 30 балів</i>
	Змістовий модуль 2 (ЗМ2)	
Виконання домашнього завдання №2	<i>Min. – 18 балів</i>	<i>Max. – 30 балів</i>
Загальна сума	36	60

Оцінка за Домашнє Завдання включає в себе: правильність розв'язку завдань та теоретичне наповнення матеріалу – максимум 15 балів / мінімум 9 балів, правильність оформлення завдань – максимум 5 балів / мінімум 3 бали, захист роботи – максимум 10 балів / мінімум 6 балів. *Захист робіт проводиться на відповідних практичних заняттях.*

На передостанньому тижні занять проводиться тематична консультація, на якій оговорюються проблемні моменти, що можуть виникнути у аспіранта при підготовці домашніх завдань.

При простому розрахунку ПО = ЗМ1 + ЗМ2 + ПсК отримаємо:

	ЗМ1	ЗМ2	ПсК (іспит)	Підсумкова оцінка (ПО)
Максимум	30	30	40	100
Мінімум	18	18	24	60
Критичний мінімум	10	10	40	60

Теми для самостійного опрацювання також виносяться на іспит.

Для здобувачів, які набрали сумарно меншу кількість балів ніж *критично-розрахунковий мінімум – 20 балів* для одержання допуску до іспиту обов'язково слід відпрацювати всі заборгованості.

У випадку відсутності здобувача з поважних причин відпрацювання та прездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

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	Практичні заняття + конс	Самост. робота
1	Вступ до мас-спектрометрії. Блок-схема приладу. Основні типи іонних джерел та мас-аналізаторів. Сумісність між системами введення проби (хроматографія, ICP), іонними джерелами та мас-аналізаторами. Роздільна здатність, чутливість та діапазон мас мас-спектрометрів. Точні маси. Ізотопний розподіл. Калібрування шкали мас.	2		10
2	Мас-спектрометрія електронної іонізації (EI). Стабільність молекулярного іона. Азотне правило. Механізми фрагментації основних класів органічних сполук. Перегрупування в мас-спектрах. Мас-спектри з хімічною іонізацією (CI): подібність та відмінність зі спектрами EI.	2		10
3	Газова хроматографія/мас-спектрометрія (ГХ-МС). Блок-схема приладу. Типи хроматограм за реєстрацією іонного струму: хроматограми повного іонного струму (TIC) та хроматограми за струмом обраного іону (SIC). Режими запису мас-хроматограм «повне сканування» (full scan) та «моніторинг обраних іонів» (selected ion monitoring). Хроматографічні колонки для ГХ/МС та їх особливості. Сумісність речовин-аналітів з методом ГХ/МС. Дериватизація. Бібліотеки мас-спектрів. Програмне забезпечення для аналізу мас-спектрів. Особливості кількісного аналізу методом ГХ/МС.	2		12
4	Рідинна хроматографія/мас-спектрометрія (РХ-МС). Блок-схема приладу. Типи хроматографічних колонок та елюатів. Іонні джерела, сумісні з РХ/МС (ESI, APCI, APPI). Особливості іонізації речовин різних класів. Утворення аддуктів, кластерів, багатозарядних іонів. Близькі до РХ-МС методи: поєднання МС з надкритичною флюїдною хроматографією та капілярним електрофорезом.	2	2	10
5	Тандемна мас-спектрометрія (МС-МС). Блок-схеми приладів для МС-МС експерименту. Іонна пастка. Потрійний квадруполь. Схеми приладів, основані на комбінації «квадруполь-часопролітний мас-спектрометр». Орбітреп. Використання тандемної мас-спектрометрії для підтверджуючого та кількісного аналізу. Моніторинг заданих реакцій (MRM).	2		10
6	Галузі практичного застосування ГХ-МС, РХ-МС та МС-МС. Екомоніторинг: аналіз пестицидів, ПАР, суперекотоксикантів. Допінг-контроль, аналіз наркотичних та лікарських засобів.	2		12

7	Застосування мас-спектрометрії для контролю каталітичних процесів та процесів термічного розкладу. Температурно-програмована десорбційна мас-спектрометрія та піролізна мас-спектрометрія. Мас-спектрометрія вторинних іонів (SIMS). Мас-спектрометрія з індуктивно-зв'язаною плазмою (ICP-MS). Застосування в технічному та екологічному аналізі.	2		10
8	Мас-спектрометрія у біохімічних дослідженнях. Протеоміка та метаболоміка. Мас-спектрометрія з лазерною десорбцією-іонізацією (MALDI). Метод мас-спектрометричної візуалізації (imaging).	2		10
9	Мас-спектрометрія ізотопних відношень (IR-MS). Розподіл стабільних ізотопів у природі та причини його варіацій. Особливості апаратурного оформлення IR-MS. Застосування МСІВ у археологічних дослідженнях, біології, ідентифікації аутентичності продуктів і напоїв, аналізі наркотичних засобів, ліків та допінгів.	2	2	12
	Консультація		2	
	ВСЬОГО	24	8	86

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекцій –**24 год.**

Практичні заняття - **8 год**

Консультації – **2 год**

Самостійна робота - **86 год.**

9. ЛІТЕРАТУРА

Основна:

1. О. В. Іщенко, С.В. Гайдай, О.А. Бєда, 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. J. Greaves, J. Roboz, Mass Spectrometry for the Novice, Taylor & Francis, 2014.
5. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D.J. Kiemle, D. L. Bryce, Spectrometric Identification of Organic Compounds, 8th Edition, Wiley 2014.

Додаткова:

6. J. T. Watson, O. D. Sparkman, Introduction to mass spectrometry, Wiley 2007.
7. R. K. Boyd, C. Basic, R. A. Bethem, Trace Quantitative Analysis by Mass Spectrometry, John Wiley & Sons, 2008