|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | **Емблема кафедри (за наявності)** | **Кафедра органічної хімії та технології органічних речовин** |
| **Мас-спектрометрія органічних сполук****Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)** |

# Реквізити навчальної дисципліни

|  |  |
| --- | --- |
| Рівень вищої освіти | *перший бакалаврський* |
| Галузь знань | *9/св хімічні технології органічних речовин* |
| Спеціальність | *161 Хімічні технології та інженерія* |
| Освітня програма | *Хімічна технологія органічних речовин* |
| Статус дисципліни | *Вибіркова* |
| Форма навчання | *очна(денна)* |
| Рік підготовки, семестр | *3 курс, перший семестр* |
| Обсяг дисципліни | *120 годин* |
| Семестровий контроль/ контрольні заходи | *Залік; письмовий* |
| Розклад занять | *Лекції - 36 год., практичні роботи – 18 год.,лабораторні роботи - 18 год.* |
| Мова викладання | *Українська* |
| Інформація про керівника курсу / викладачів | Лектор: *к.х.н., старший викладач, Клімко Юрій Євгенович, yeklimko@ukr.net*Практичні: *к.х.н., старший викладач, Клімко Юрій Євгенович, yeklimko@ukr.net* |
| Розміщення курсу | Посилання на дистанційний ресурс (Moodle, https://do.ipo.kpi.ua/login/?lang=ru. |

# Програма навчальної дисципліни

# Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчання та результати навчання

# Предметом навчальної дисципліни є набуття знань та навичок з методів контролю технологічних процесів органічного синтезу та встановлення будови органічних сполук. *Метою кредитного модуля Мас-спектрометрія органічних сполук є формування у студентів здатностей:*

здатність використовувати теоретичні знання й практичні навички природничо-наукових та професійно орієнтованих навчальних дисциплін для оволодіння основами організації та методології наукових досліджень хіміко-технологічних систем (КСП – 4);

* *здатність використовувати професійно профільовані знання й практичні навички в галузі основ хімічної технології органічних сполук для оцінювання техніко-економічних показників хімічних та хіміко-технологічних процесів (КСП -5);*
* *здатність використовувати знання, уміння й навички в галузі природничо-наукових дисциплін для теоретичного освоєння професійних дисциплін і вирішення практичних завдань з хімічної технології органічних речовин (КСП -10).*

# *Основні завдання кредитного модуля.*

# *Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенти після засвоєння кредитного модуля «Мас-спектроскопія органічних сполук» мають продемонструвати такі результати навчання:*

# *знання:*

* *теоретичні основи мас-спектрометричних методів дослідження складу та структури органічних речовин;*
* *можливості та області застосування мас-спектрометрії органічних сполук;*
* *методи розрахунку деяких спектральних параметрів органічних речовин.*

# *уміння:*

* *на підставі отриманих практичних навичок з аналітичної хімії проводити аналіз сировини, продукції та стічних вод хімічними та фізико-хімічними методами в умовах лабораторії або виробництва для складання технологічного регламенту або ТЗ, контролю або розроблення технології.*
* *використовувати теоретичні положення загальної хімії та хімії елементів з метою вирішення типових задач фізико-хімічних процесів хімічної технології.*

# *досвід:*

* *вміти використовувати сучасні джерела наукової інформації з тематики дослідження;*

*- вміти застосовувати сучасні методи теоретичного та експериментального аналізу.*

# Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за *відповідною освітньою програмою)*

*Згідно робочого навчального плану кредитний модуль «Мас-спектрометрія органічних сполук» навчальної дисципліни «Мас-спектрометрія органічних сполук» викладається студентам четвертого року підготовки ОКР «бакалавр» у восьмому навчальному семестрі. Кредитний модуль “Мас-спектрометрія органічних сполук” відноситься до фахових дисциплін і базується на курсах “Загальна та неорганічна хімія”, “Органічна хімія”, “Аналітична хімія”, “Фізична хімія”, “Фізика”, “Вища математика” та “Технічна механіка”. Курс дає знання та вміння з методів контролю технологічних процесів органічного синтезу та встановлення будови органічних сполук. Кредитний модуль відноситься до циклу дисциплін з професійної та практичної підготовки бакалаврів. В навчальному плані він (код 2.2.11) пов’язаний з кредитним модулем «Хімія елементорганічних сполук». Компетенції, отримані студентами в процесі вивчення цієї дисципліни застосовуються ними при виконанні технологічного проекту.*

# Зміст навчальної дисципліни

*Лекції:*

# *Тема 1 – Методи та обладнання мас-спектрометрії.*

# *Тема 2 – Мас-спектри основних класів органічних сполук.*

*Практичні роботи:*

 *Тема 1 - критерії молекулярного іону, встановлення молекулярного іону*

 *Тема 2 - визначення елементного складу іонів на основі ізотопних піків.*

 *Тема 3 - алгоритм інтерпретації мас-спектру при наявності молекулярного іону та*

 *Тема 4 - алгоритм інтерпретації мас-спектру при відсутності молекулярного іону*

 *та/або ізотопних піків.*

 *Тема 5 - встановлення будови алканів, циклоалканів та алкенів за*

 *їх мас-спектрами.*

 *Тема 6 - встановлення будови ароматичних вуглеводнів та спиртів за*

 *їх мас-спектрами.*

 *Тема 7 - встановлення будови карбонільних сполук за їх мас-спектрами.*

 *Тема 8 - встановлення будови амінів за їх мас-спектрами.*

 *Тема 9 - встановлення будови галогенопохідних за їх мас-спектрами.*

*Індивідуальні завдання:*

*Метою індивідуального завдання є опрацювання лекційного матеріалу шляхом розв’язування задач з ідентифікації органічних сполук за допомогою мас-спектрів, розрахунки спектральних характеристик. Передбачена розрахункова робота, що складається з 5 задач, які охоплюють всі теми курсу.*

*Письмове опитування:*

*Для перевірки засвоєння студентами знань, отриманих при прослуховуванні лекцій та при виконанні лабораторних робіт у відповідності до учбового плану проводиться 4 письмові опитування на протязі всього семестру та модульна контрольна робота. Завдання письмових опитувань носять практичний характер. Письмові опитування проводиться за всіма темами кредитного модуля.*

# Навчальні матеріали та ресурси

***Базова***

1. *Преч Э. Определение строения органических соединений: пер. с англ./ Э.Преч, Ф. Бюльман, К. Аффольтер. – М.: Бином, 2006. - 438 с.*
2. *Сильверстейн Р. Спектрометрическая интерпретация органических соединений: пер. с англ./ Р.Сильверстейн , Ф. Вебстер, Д Кимл . – М.: Бином, 2011. – 557 с.*
3. *Вульфсон Н.С. Масс-спектрометрия органических соединений/ Н.С.Вульфсон, В.Т.Заикин, А.И.Микая. М.: Химия, 1986. - 312 с.*
4. *Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии/ А.Т.Лебедев. - М.: Бином, 2007. - 493 с.*
5. *Методические указания и контрольные задания к самостоятельной работе студентов по курсу «Современные методы разделения и идентификации органических соединений» / Сост. А.Г.Юрченко, С.Д.Исаев, И.Р.Лихотворик – Киев: КПИ, 1988. – 64 с.*

***Допоміжна***

1. *Иоффе Б.В. Физические методы определения строения органических молекул: учебник для вузов/ Б.В.Иоффе, Р.Р.Костиков, В.В.Разин. – Л.: Изд. Ленинградского университета, 1984. - 336 с.*
2. *Миронов В.А. Спектроскопия в органической химии/ В.А.Миронов, С.А.Янковский. – М.: Химия, 1985. - 232 с.*

# Навчальний контент

# Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Назви розділів і тем* | *Всього* | *Лекції* | *Прак* | *Лаб* | *СРС* |
| *Тема 1 – Методи та обладнання мас-спектрометрії.* | *40* | *12* | *6* | *6* | *16* |
| *Тема 2 – Мас-спектри основних класів органічних сполук.* | *62* | *24* | *12* | *6* | *20* |
| *Модульна контрольна робота* | *6* | *-* | *-* | *3* | *3* |
| *РР* | *6* | *-* | *-* | *-* | *6* |
| *Залік* | *6* | *-* | *-* | *3* | *3* |
| *Всього годин* | *120* | *36* | *18* | *18* | *48* |

***Лекційні заняття***

|  |  |
| --- | --- |
| *№ з/п* | *Назва теми лекції та перелік основних питань* *(перелік дидактичних засобів, посилання на літературу та завдання на СРС)* |
| ***Тема 1 – Матеріали для хімічного машинобудування.*** |
| *1* | Фізичні основи мас-спектрометрії. Методи іонізації органічних молекул.Методи розділення іонів.*Література [2,4].**СРС: теоретичні основи мас-спектрометрії.**Література[4].* |
| *2* | Типи іонів, що фіксуються мас-спектрометром. Роздільна здатність мас-спектрометру.*Література [2,4].**CРC: критерії визначення молекулярного іону.* *Література [2,4].*  |
| *3* | Блок-схема мас-спектрометру електронного удару. Методи визначення брутто-формули за спектрами низької та високої роздільної здатності.*Література [2,4].**CРC: розрахунки співвідношення піків в кластері молекулярного іону.**Література [2,4].* |
| *4* | Азотне правило, парно-електронне правило. Закономірності появи молекулярних, фрагментних та перегрупованих іонів. Хроматомас-спектрометрія. Знайомство з газо-рідинним хроматографом з мас-спектрометричним детектором.*Література [2,4].**СРС:поглиблене вивчення мас-спектрометричних правил та типів перегрупувань.**Література [2,4].* |
| *5* | Хроматомас-спектрометрія. Знайомство з газо-рідинним хроматографом з мас-спектрометричним детектором.*Література [2,4].**СРС: поглиблене вивчення теми.**Література [2,4].* |
| *6* | *Альтернативні методи іонізації зразка. Тандемна мас-спектрометрія.**Література [2,4].**СРС: поглиблене вивчення теми.**Література [2,4].* |
| *Тема 2. Мас-спектри основних класів органічних сполук.* |
| *1* | Особливості мас-спектрів алканів та алкенів.*Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [4].* |
| *2* | Особливості мас-спектрів ароматичних вуглеводнів.*Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [4].* |
| *3* | Особливості мас-спектрів амінів. *Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [3].* |
| *4* | Особливості мас-спектрів етерів та сульфідів. *Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [3,4].* |
| *5* | Особливості мас-спектрів дисульфідів. *Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [3,4].* |
| *6* | Особливості мас-спектрів спиртів, тіолів. *Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [3,4].* |
| *7* | Особливості мас-спектрів карбонільних сполук: альдегідів та кетонів. *Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [3,4].* |
| *8* | Особливості мас-спектрів карбонільних сполук: карбонових кислот та естерів. *Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [3,4].* |
| *9* | Особливості мас-спектрів галогенопохідних. *Література [1,3,4].**CРС: розрахунки співвідношення піків в кластері молекулярного іону галогенопохідних.* *Література [3,4].* |
| *10* | *Особливості мас-спектрів фенолів.**Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [3,4].* |
| *11* | *Особливості мас-спектрів сульфоксидів, сульфонів, сульфокислот**Література [1,3,4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [3,4].* |
| *12* | *Кількисний мас-спектрометричний аналіз**Література [4].**CРС: поглиблене вивчення теми.* *Література [4].* |

***Практичні заняття***

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *№**з/п* | *Назва теми* | *Кількість годин* |
| *1* | *Завдання:* критерії молекулярного іону, встановлення молекулярного іону.*Завдання на СРС*: повторення матеріалу лекцій.*Література [1,3,4].* | *2* |
| *2* | *Завдання: визначення елементного складу іонів на основі ізотопних піків.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,3,4].* | *2* |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *3* | *Завдання: алгоритм інтерпретації мас-спектру при наявності молекулярного іону та**ізотопних піків.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,4,4].* | *2* |
| *4* | *Завдання: алгоритм інтерпретації мас-спектру при відсутності молекулярного іону**та/або ізотопних піків.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,3,4].* | *2* |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *5* | *Завдання: встановлення будови алканів, циклоалканів та алкенів за**їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,3,4].* | *2* |
| *6* | *Завдання: встановлення будови ароматичних вуглеводнів та спиртів за**їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,3,4].* | *2* |
| *7* | *Завдання: встановлення будови карбонільних сполук за їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,3,4].* | *2* |
| *8* | *Завдання: встановлення будови амінів за їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,3,4].* | *2* |
| *9* | *Завдання: встановлення будови галогенопохідних за їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,3,4].* | *2* |

***Лабораторні роботи***

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *№**з/п* | *Назва теми* | *Кількість годин* |
| *1* | *Встановлення молекулярного іону по мас-спектру.* *Завдання на СРС*: *повторення матеріалу лекцій та практичної роботи**Література [1,3,4].* | *2* |
| *2* |  *Визначення елементного складу іонів по мас-спектру на основі ізотопних піків.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,3,4].* | *2* |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *3* | *Завдання: алгоритм інтерпретації мас-спектру при наявності молекулярного іону та**ізотопних піків.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій та практичної роботи**Література [1,4,4].* | *2* |
| *4* |  *Інтерпретації мас-спектру при відсутності молекулярного іону**та/або ізотопних піків.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій та практичного заняття**Література [1,3,4].* | *2* |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *5* |  *Встановлення будови алкана, циклоалкана та алкену за**їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій та практичного заняття**Література [1,3,4].* | *2* |
| *6* |  *Встановлення будови ароматичних вуглеводнів(два спектри) та спиртів (два спектри) за їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій.**Література [1,3,4].* | *2* |
| *7* |  *Встановлення будови карбонільної сполуки (три спектри) за їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій та практичної роботи.**Література [1,3,4].* | *2* |
| *8* |  *Встановлення будови амінів (три спектри) за їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій та практичної роботи**Література [1,3,4].* | *2* |
| *9* |  *Встановлення будови галогенопохідних (три спектри) за їх мас-спектрами.**Завдання на СРС: повторення матеріалу лекцій та практичної роботи**Література [1,3,4].* | *2* |

# Самостійна робота студента

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *№ з/п* | *Назва теми, що виноситься на самостійне опрацювання* | *Кількість годин СРС* |
| *1* | Тема 1. Теоретичні основи мас-спектрометрії. Критерії визначення молекулярного іону. Розрахунки співвідношення піків в кластері молекулярного іону галогенопохідних. Поглиблене вивчення мас-спектрометричних правил та типів перегрупувань. Схеми новітніх мас-спектрометрів.*Література [2,7,9].* | *16* |
| *2* | Тема 2. Поглиблене вивчення мас-спектрів гетероциклічних сполук. Розрахунки співвідношення піків в кластері молекулярного іону галогенопохідних.*Література [2,7,9].* | *20* |
| *3* | МКР | *3* |
| *4* | РР | *6* |
| *5* | Залік | *3* |

# Політика та контроль

# Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

*система вимог, які викладач ставить перед студентом:*

* *відвідуваня лекцій та практичних занять є обов’язковим;*
* *під час занять обов’язковим є відключення телефонів;*
* *не допускається до заліку студенти, які не виконали індивідуального завдання.*

# Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (РСО)

**1. Письмові опитування.**

*Письмове опитування вважається захистом лаборптоної роботи. Ваговий бал – 10. Максимальна кількість балів на усіх чотирьох письмових опитуваннях дорівнює: 10 бал. × 4= 40 балів.*

***Критерії оцінювання письмового опитування:***

***10-9 балів:*** *безпомилкова, чітка та бездоганна відповідь на поставлене запитання, відсутність хімічних та граматичних помилок, наявність акуратних та правильних з точки зору будови речовини малюнків;*

***8-7 бали:*** *безпомилкова, відповідь на поставлене запитання, відсутність помилок, наявність правильних з точки зору будови речовини малюнків; присутні граматичні помилки у термінах, неакуратно та нечітко зроблені малюнки;*

***6-5 бали:*** *вірні термінологічні назви (але не менше 50 %); наявність принципових помилок у відповідях;*

***4-0 балів****: відповідь принципово невірна або відсутня.*

**2.** **Розрахункова робота ( РР ).**

*Завдання на ДКР складається з 5 задач. Ваговий бал – 20.*

***Критерії оцінювання РР:***

***20 балів:*** *безпомилкове вирішення усіх розрахункових вправ і бездоганні відповіді на теоретичні питання при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних знань з фізики та спектроскопії при вирішенні контрольних завдань;*

***18-14 балів:*** *вирішення усіх розрахункових вправ з незначними, непринциповими помилками (в т.ч. математичного характеру); наявність 1-2 помилок та 1-2 зауважень щодо вміння застосовувати фундаментальні знання з хімії, фізики та спектроскопії при вирішенні контрольних завдань;*

***12-8 бали:*** *вирішення усіх розрахункових вправ з 2-3 досить суттєвими помилками; наявність суттєвих зауважень до теоретичних викладок, помилки у формулах;*

***6-2 бали:*** *вірне вирішення розрахункових вправ (але не менше 50 %); наявність принципових помилок у відповідях.*

***1-0 балів:*** *відповідь принципово невірна або відсутня.*

**3. Модульна контрольна робота ( МКР ).**

*Кількість завдань цього виду – 1.*

*Завдання на МКР складається з однієї задачі, умовою якої є спектральні характеристики невідомої речовини (мас-спектр). За спектральними даними студент повинен встановити будову речовини. Ваговий бал – 40 балів.*

***Критерії оцінювання МКР:***

***40 балів:*** *безпомилкове вирішення задачі , бездоганні відповіді на теоретичні питання при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних знань з фізики та спектроскопії при вирішенні контрольних завдань;*

***39-30 балів:*** *вирішення задачі з незначними, непринциповими помилками (в т.ч. математичного характеру); наявність 1-2 помилок та 1-2 зауважень щодо вміння застосовувати фундаментальні знання з хімії, фізики та спектроскопії при вирішенні контрольних завдань.*

***29-20 балів:*** *вирішення задачі з двома –трьома досить суттєвими помилками; наявність суттєвих зауважень до теоретичних викладок, помилки у формулах;*

***19-10 балів:*** *невірне вирішення задачі через наявність принципових помилок у відповіді;*

***9-0 балів:*** *відповідь принципово невірна або відсутня.*

**Розрахунок шкали рейтингової оцінки з кредитного модуля:**

*Сума вагових балів контрольних заходів (RC) протягом семестру складає:*

 *RC = 40 + 20+40 = 100*

*Для отримання заліку з кредитного модуля «автоматом» необхідно мати рейтинг не менше 60 балів.*

**4. Залік**

*Студенти, які наприкінці семестру мають рейтинг менше 60 балів, а також ті, хто хоче підвищити оцінку в системі ECTS, виконують залікову контрольну роботу. При цьому їх отримані раніше бали анулюються і рахуються лише бали за залікову контрольну роботу і ця* ***рейтингова оцінка є остаточною****.*

*Залік з даної частини кредитного модуля проводиться у письмовій формі. Білет складається з п’яти завдань. Ваговий бал – 5х20=100 балів.*

***Критерії оцінювання кожного питання залікової контрольної роботи*:**

***20-19 балів****: «відмінно» – безпомилкове вирішення усіх розрахункових вправ при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних знань з хімії при вирішенні контрольних завдань;*

***18-15 балів:*** *«добре» – вирішення усіх розрахункових вправ з незначними, непринциповими помилками (в т.ч. математичного характеру); наявність 1-2 помилок та 1-2 зауважень щодо вміння застосовувати фундаментальні знання з хімії при вирішенні контрольних завдань та відповіді на теоретичні питання;*

***14-11 балів:*** *«задовільно» – вирішення усіх розрахункових вправ з двома –трьома досить суттєвими помилками; наявність суттєвих зауважень до теоретичних викладок, помилки у формулах;*

***10-0 балів:*** *відповідь принципово невірна або відсутня.*

 *Для отримання студентом відповідних оцінок (ECTS – European Credit Transfer System – Європейської кредитно-трансферної та акумулюючої системи – та традиційних) сума балів за кожну з 4-х задач контрольної роботи та виконання лабораторних робіт переводиться до залікової оцінки згідно з таблицею*:

*Семестровий контроль: залік*

*Умови допуску до семестрового контролю: семестровий рейтинг більше 50 балів.*

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

|  |  |
| --- | --- |
| *Кількість балів* | *Оцінка* |
| 100-95 | Відмінно |
| 94-85 | Дуже добре |
| 84-75 | Добре |
| 74-65 | Задовільно |
| 64-60 | Достатньо |
| Менше 60 | Незадовільно |
| Не виконані умови допуску | Не допущено |

# 5. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Письмове опитування.

з освітнього компоненту „Мас-спектрометрія органічних речовин”

Варіант №

 Ідентифікуйте сполуку по мас-спектру електронного удару.



Модульна контрольна робота.

з освітнього компоненту „Мас-спектрометрія органічних речовин”

Варіант №

 Ідентифікуйте сполуку по спектру електронного удару.

****

Розрахункова робота.

з освітнього компоненту „Мас-спектрометрія органічних речовин”

Завдання №

 Ідентифікуйте сполуку по спектру електронного удару.



**Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):**

**Складено** д к.х.н., старший викладач кафедри ОХ та ТОР, Клімко Юрій Євгенович

**Ухвалено** кафедрою ОХ та ТОР (протокол № 12 від 28.06.22)

**Погоджено** Методичною комісією факультету[[1]](#footnote-1) (протокол № 10 від 23.06.22)

1. Методичною радою університету – для загальноуніверситетських дисциплін. [↑](#footnote-ref-1)