Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
факультет Почвоведения

УТВЕРЖДАЮ

и.о. декана П.В.Красильников /_____ /

«___» _____20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины:

МЕТОДЫ АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ В ХИМИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ ПОЧВ

Уровень высшего образования:

Магистратура

Направление подготовки (специальность):

06.04.02 Почвоведение

Направленность (профиль) ОПОП:

Химия почв

Форма обучения: очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена учебно-методической комиссией факультета почвоведения (протокол №_____, дата _____)

Москва 2021

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки *химия почв* программы *магистратуры* ***06.04.02 Почвоведение***

ОС МГУ утвержден решением Ученого совета МГУ имени М.В.Ломоносова от _____ 20__ года (протокол №__).

1. **Место дисциплины в структуре ОПОП:** базовая часть, профессиональный блок.

2. **Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:**

иностранный язык
безопасность жизнедеятельности
информатика
высшая математика
физика
общая химия
физическая химия
коллоидная химия
экология
органическая химия
аналитическая химия
математическая статистика
почвоведение
химия почв
практикум по химии почв
химический анализ почв

3. **Планируемые результаты обучения в результате освоения дисциплины, соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников:**

Компетенции выпускников (коды)	**Индикаторы (показатели) достижения компетенций**	**Планируемые результаты обучения по дисциплине, сопряженные с компетенциями**
М-СПК-1	**М-СПК-1.1** Применяет физико-химические методы качественного и количественного анализа веществ в почвах **М-СПК-1.2** Использует в практической деятельности современные физико-химические инструментальные методы качественного и количественного анализа веществ в почвах	*Знает:* Основы метода атомно-эмиссионной спектрометрии и атомно-абсорбционной спектрометрии. Основы метода хромато-масс-спектрометрии и масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой, тандемной масс-спектрометрии, общие принципы работы с масс-спектрометрами и специализированным программным обеспечением. Основы применения методов АЭС-ААС и масс-

		спектрометрии в области почвоведения и почвенно-экологического мониторинга. *Умеет:* Работать на аналитическом лабораторном оборудовании. Осваивать новый опыт использования оборудования повышенной сложности. Использовать специальное программное обеспечение. Производить лабораторные исследования, замеры, анализы отобранных природных образцов. *Владеет:* Методами подготовки проб воздуха, воды и почвы к химическому анализу. Техникой химического анализа по стандартным методикам. Методиками проведения лабораторных исследований природных образцов. *Имеет опыт деятельности:* в области количественного определения элементов методами АЭС, ААС и масс-спектрометрического анализа в почвенных образцах.
М-СПК-2	**М-СПК-2.1** Выбирает методы химического анализа и способы представления результатов для оценки почв **М-СПК-2.2** Способен представить результаты оценки качества почв	*Знает:* Основы метода атомно-эмиссионной спектрометрии и атомно-абсорбционной спектрометрии. Основы метода хромато-масс-спектрометрии и масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой, тандемной масс-спектрометрии, общие принципы работы с масс-спектрометрами и специализированным программным обеспечением.

		Основы применения методов АЭС-ААС и масс-спектрометрии в области почвоведения и почвенно-экологического мониторинга. *Умеет:* Работать на аналитическом лабораторном оборудовании. Осваивать новый опыт использования оборудования повышенной сложности. Использовать специальное программное обеспечение. Производить лабораторные исследования, замеры, анализы отобранных природных образцов. *Владеет:* Методами подготовки проб воздуха, воды и почвы к химическому анализу. Техникой химического анализа по стандартным методикам. Методиками проведения лабораторных исследований природных образцов. *Имеет опыт деятельности:* в области количественного определения элементов методами АЭС, ААС и масс-спектрометрического анализа в почвенных образцах.

4. **Объем дисциплины** _____3_____з.е.**,** в том числе _____90_____академических часов на контактную работу обучающихся с преподавателем, _____18_____академических часов на самостоятельную работу обучающихся.

5. **Формат обучения** лекции с использованием средств дистанционного сопровождения учебного процесса, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа обучающихся.

6. **Содержание дисциплины, структурированное по разделам и темам, с указанием отведенного на них количества академических часов, и виды учебных занятий**:

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины / форма текущей аттестации *(это может быть тестирование, доклад с презентацией, устный опрос и т.д.)*	**Всего (часы)**	В том числе							
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) ***Виды контактной работы, часы из учебного плана***					**Самостоятельная работа обучающегося** ***Виды самостоятельной работы, часы*** *(это может быть подготовка докладов, рефератов, анализ литературы и др.)*		
		Занятия лекционного типа *(по учебному плану)*	Занятия семинарского типа (семинары) *(по учебному плану)*	Занятия семинарского типа (лабораторные) *(по учебному плану)*	Занятия семинарского типа (практические) *(по учебному плану)*	**Всего**	Анализ литературы		**Всего**
Раздел 1. Атомно-эмиссионная спектрометрия	29	2	13	9	нет	24	5	нет	5
Форма текущей аттестации по разделу – устный опрос									
Раздел 2. Атомно-абсорбционная спектрометрия	25	2	10	9	нет	21	4	нет	4
Форма текущей аттестации по разделу – устный опрос									
Раздел 3. Масс-спектрометрия	54	5	22	18	нет	45	9	нет	9
Форма текущей аттестации по разделу – устный опрос									
Промежуточная аттестация - зачет	зачет					6			
Итого:	108	90				18			

Подробное содержание разделов и тем дисциплины:

Лекции.

РАЗДЕЛ 1. АТОМНО-ЭМИССИОННАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ

Тема 1. Основы метода АЭС.

История развития метода. Строение атома. Понятие спектра. Источники возбуждения спектров. Способы монохромирования излучения. Способы детектирования излучения. Эмиссионная фотометрия пламени. Оборудование для пламенной фотометрии. Применение методов АЭС и фотометрии пламени в химическом анализе почв. Возможности и ограничения.

РАЗДЕЛ 2. АТОМНО-АБСОРБЦИОННАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ

Тема 1. Теоретические основы метода ААС

Поглощение излучения атомами. Спектры поглощения и аналитические линии. Основной закон светопоглощения. Источники излучения в ААС. Образование поглощающего слоя атомов. Способы получения атомного пара. Пламенные и непламенные атомизаторы. Графитовые кюветы и графитовые печи. Комбинированные системы. Источники характеристического излучения. Источники излучения сплошного спектра. Монохромирование излучения. Детекторы излучения, применяемые в ААС. Приборы и аппаратура, применяемые в ААС. История развития метода. Чувствительность и точность определения. Возможные помехи. Использование метода ААС в химии почв. Возможности и ограничения.

РАЗДЕЛ 3. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ

Тема 1. Основы метода масс-спектрометрии

История развития метода. Масс-спектры. Фрагментация и ионизация молекул. Принцип разделения фрагментов по массе и заряду. Типы ионизации неорганических молекул и атомов. Реакции фрагментации органических молекул. Молекулярный ион. Расчет и сборка структурной формулы соединения по реакциям фрагментации. Библиотеки масс-спектров.

Тема 2. Способы ионизации и фрагментации в масс-спектрометрии

Способы ионизации неорганических соединений: индуктивно-связанная плазма, термоионизация, ионизация в тлеющем разряде, лазерная абляция. Способы фрагментации и ионизации органических молекул. Ионизация в газовой фазе; электронный удар и химическая ионизация. Ионизация в жидкой фазе; типы и режимы работы распылителей. Ионизация в твердой фазе; способы ионизации десорбцией, матрично-активированная лазерная десорбция-ионизация.

Тема 3. Типы масс-анализаторов и принципы детектирования

Секторные магнитные масс-спектрометры. Масс-анализаторы с ионной ловушкой. Квадрупольные масс-анализаторы. Времяпролетные масс-анализаторы. Системы вакуумирования в масс-спектрометрическом анализе. Способы регистрации и умножения электронного сигнала. Детектирование в режиме сканирования и в режиме избранных ионов. Аппаратура, современные модели масс-спектрометров и масс-детекторов.

Семинары.

РАЗДЕЛ 1. АТОМНО-ЭМИССИОННАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ

Тема 1. Устройство атомно-эмиссионного спектрометра и основные принципы его работы.

Тема 2. Примененение метода АЭС в химическом анализе природных объектов.

Тема 3. Подготовка образцов к анализу, стандартизация. Выполнение анализа и интерпретация результатов.

Тема 4. Фотометрия пламени как вид атомно-эмиссионного анализа. Особенности метода, аппаратура. Ограничения использования в химическом анализе почв.

Тема 5. Эволюция метода фотометрии пламени. Новейшая аппаратура и особенности её использования при анализе почв и природных вод.

Тема 6. Перспективы развития метода АЭС и его применения для анализа природных объектов.

РАЗДЕЛ 2. АТОМНО-АБСОРБЦИОННАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ.

Тема 1. История развития атомно-абсорбционного анализа.

Тема 2. Типы приборов. Пламенная и электротермическая атомизация проб, достоинства и недостатки. Оптические схемы. Способы монохромирования излучения. Детекция излучения и его преобразование.

Тема 3. Системы обработки информации и автоматизация анализа.

Тема 4. Особенности использования метода для анализа природных объектов.

Тема 5. Перспективы развития метода ААС.

РАЗДЕЛ 3. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ.

Тема 1. Разрешающая способность масс-спектрометра, ее влияние на качество идентификации. Типы масс-спектрометров низкого и высокого разрешения.

Тема 2. Хромато-масс-спектрометрия. Масс-спектрометры как детекторы в газовой хроматографии (ГХ-МС). Новейшие методы на основы ГХ-МС.

Тема 3. Масс-спектрометры в жидкостных хроматографах (ВЭЖХ-МС). Десорбционная электрораспылительная ионизация. Масс-спектрометрия в нормальных условиях.

Тема 4. Масс-спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой. Преимущества и недостатки метода. Возможности использования в экологическом мониторинге.

Тема 5. Тандемная масс-спектрометрия. Принцип анализа дочерних ионов. Преимущества метода тандемной масс-спектрометрии, возможности использования в современных методиках определения суперэкотоксикантов.

Тема 6. Использование специализированного программного обеспечения и библиотек масс-спектров в экологическом анализе.

Тема 7. Передовые методы на основе масс-спектрометрии.

Тема 8. Области применения масс-спектрометрии в почвоведении. Возможности элементного анализа и анализа органических соединений. Гуминомика.

Тема 9. Применение масс-спектрометрии в области почвенно-экологического мониторинга. Примеры определения различных классов поллютантов. Петролеомика.

Тема 10. Общие принципы работы с масс-спектрометрами. Выбор метода анализа, способа ионизации и параметров детектирования. Качественный и количественный анализ, чувствительность метода. Калибровка масс-спектрометров, используемые стандарты.

<u>Лабораторные работы</u>

РАЗДЕЛ 1. АТОМНО-ЭМИССИОННАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ

Тема 1. Атомно-эмиссионный спектрометр. Устройство, обслуживание, подготовка к работе. Анализ твердых проб. Особенности стандартизации.

Тема 2. Пламенный фотометр. Устройство, обслуживание, подготовка к работе. Анализ почвенных вытяжек и природных вод.

РАЗДЕЛ 2. АТОМНО-АБСОРБЦИОННАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ

Тема 1. Атомно-абсорбционный спектрометр. Устройство, обслуживание, подготовка к работе. Пламенный и электротермический методы атомизации проб.

Тема 2. Анализ почвенных вытяжек методом ААС, обработка и интерпретация полученных данных.

РАЗДЕЛ 3. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ

Тема 1. Современное программное обеспечения для проведения анализа методом ГХ-МС и ВЭЖХ-МС.

Тема 2. Проведение идентификации соединений с помощью специализированного программного обеспечения и баз данных масс-спектров

Тема 3. Масс-спектрометр низкого разрешения. Устройство, техническое обслуживание, процедура подготовки к работе. Настройка масс-спектрометра, выбор режима работы.

Тема 4. Масс-спектрометр высокого разрешения. Устройство, техническое обслуживание, процедура подготовки к работе. Настройка масс-спектрометра, выбор режима работы.

Тема 5. Тандемный масс-спектрометр. Влияние режима работы на качество идентификации и количественный результат.

Тема 6. Использование различных типов регистрации ионного тока для количественного определения соединений.

7. **Фонд оценочных средств для оценивания результатов обучения по дисциплине**:

7.1. **Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля:**

Рекомендуемые темы рефератов:

1. Особенности и перспективы использования метода АЭС в почвоведении.
2. Причины ограничений использования метода фотометрии пламени в химическом анализе почв.
3. Современные приборы для фотометрии пламени.
4. Способы повышения чувствительности измерений в методе ААС применительно к химическому анализу почв.
5. Совершенствование аналитической аппаратуры в ААС анализе.
6. Развитие масс-спектрометрии как метода анализа объектов окружающей среды.
7. Типы современных масс-спектрометров.
8. ИСП-МС. Преимущества метода.
9. Области применения масс-спектрометрии в химическом анализе почв.
10. Подходы к определению экотоксикантов методом хромато-масс-спектрометрии.

7.2. **Типовые контрольные вопросы, задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации:**

Раздел 1.

1. Понятие спектра. Происхождение спектров.

2. Принцип метода АЭС.
3. Способы получения спектров в методе АЭС.
4. Детектирование излучения. Виды детекторов.
5. Фотометрия пламени.
6. Особенности применения методов АЭС и фотометрии пламени в почвоведении.

Раздел 2.
1. Принцип метода ААС.
2. Способы формирования атомного пара. Атомизаторы.
3. Основной закон светопоглощения.
4. Источники излучения в ААС.
5. Детекция характеристического излучения в ААС.
6. Автоматизация анализа и адаптация метода к почвенно-химическим исследованиям.

Раздел 3.
1. Принцип метода масс-спектрометрии.
2. Реакции фрагментации. Масс-спектры.
3. Способы атомной ионизации. ИСП-МС.
4. Ионизация молекул в газовой фазе. ЭУ и ХИ.
5. Принцип ионизации электроспреем.
6. Ионизация твердофазной десорбцией. МАЛДИ.
7. Квадрупольные и времяпролетные масс-анализаторы.
8. Хромато-масс-спектрометрия.
9. Тандемная масс-спектрометрия. Примеры МС-МС режимов.
10. Качественный и количественный анализ в масс-спектрометрии.

8. **Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине:**

В таблице представлена шкала оценивания результатов обучения по дисциплине. Уровень знаний обучающегося оценивается на "отлично", "хорошо", "удовлетворительно", "неудовлетворительно".

Оценка "отлично" выставляется, если обучающийся демонстрирует сформированные систематические знания, умения и навыки их практического использования. Оценка "хорошо" ставится, если при демонстрации знаний, умений и навыков студент допускает отдельные неточности (пробелы, ошибочные действия) непринципиального характера. При несистематических знаниях, демонстрации отдельных (но принципиально значимых навыков) и затруднениях в демонстрации других навыков выставляется оценка «удовлетворительно». Оценка "неудовлетворительно" ставится, если знания и умения фрагментарны, а навыки отсутствуют.

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ результатов обучения (РО) по дисциплине				
Оценка РО и соответствующие виды оценочных средств	**2**	**3**	**4**	**5**
Знания	Отсутствие	Фрагментарные	Общие, но не	Сформированные

устные опросы	знаний	знания	структурированные знания	систематические знания
Умения Практические контрольные задания	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения, опыт деятельности) Практические задания	Отсутствие навыков (владений, опыта)	Наличие отдельных навыков (наличие фрагментарного опыта)	В целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме	Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач

9. **Ресурсное обеспечение:**

Перечень основной и дополнительной учебной литературы.

Основная.

1. Основы аналитической химии. Т.2. Методы химического анализа. Под ред. Ю.А. Золотова. М.: Высшая школа, 2002
2. Пупышев А.А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ. М.: Техносфера, 2009
3. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: Бином, 2003
4. Юинг Г. Инструменталь-ные методы химического анализа. М.: Мир, 1989
5. Чепмен Дж. Практическая органическая масс-спектрометрия. М.: Мир, 1988
6. Scott R.P.W. Tandem techniques. London, Wiley&Sons, 1997

Дополнительная.

1. Теория и практика химического анализа почв. Под ред. Л.А. Воробьевой, М.: Геос, 2006
2. Пупышев А.А., Данилова Д.А. Атомно-эмиссионный спектральный анализ с индуктивно-связанной плазмой и тлеющим разрядом по Гриму. Екатеринбург, ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2002
3. Обухов А.И., Плеханова И.О. Атомно-абсорбционный анализ в почвенно-биологических исследованиях. М.: МГУ, 1991
4. Другов Ю.С., Родин А.А. Газохроматографическая идентификация загрязнений воздуха, воды и почвы. Санкт-Петербург, Теза, 1999
5. Dean J.R. Methods for environmental trace analysis. London, Wiley&Sons, 2003
6. Reeve R.N. Introduction to environmental analysis. London, Wiley&Sons, 2002

- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

http://www.vmso.ru
http://www.chem.agilent.com
http://www.epa.gov
http://www.iso.org

- Описание материально-технической базы:

Помещения:

- учебная аудитория для проведения лекционных занятий и семинарских занятий, оборудованная оргтехникой;
- лабораторные помещения, оборудованные для проведения процедур пробоподготовки и химического анализа проб (оборудованные постоянным источником электрического питания, воды, системой вентиляции, вытяжными шкафами; отвечающие условиям противопожарной безопасности и техническим требованиям, предъявляемым к аналитическим лабораториям).

Оборудование:

- необходимая оргтехника (ЭВМ, проектор и др.);
- оборудование для проведения химического анализа веществ в пробах воздуха, воды и почвы (оборудование для хранения, сушки, гомогенизации и фильтрации проб; оборудование для экстракции и концентрирования проб; атомно-абсорбционные и атомно-эмиссионные спектрометры; пламенные фотометры; масс-спектрометры; весы различных классов точности; вспомогательное лабораторное оборудование; лабораторная посуда и расходные материалы; компьютерное оборудование со специализированными программными модулями).

Иные материалы:

- демонстрационные материалы.

10. **Язык преподавания: русский.**

11. **Преподаватели:**

1. Кирюшин Алексей Валериевич
Старший преподаватель
Кандидат биологических наук, 29.04.2003, МГУ им. М.В. Ломоносова
2. Завгородняя Юлия Анатольевна
Доцент
Кандидат биологических наук, 25.02.2000, МГУ им. М.В. Ломоносова
Ученое звание (когда и кем присвоено)

12. **Разработчики программы:**

1. Завгородняя Юлия Анатольевна
Доцент
Кандидат биологических наук, 25.02.2000, МГУ им. М.В. Ломоносова
Ученое звание (когда и кем присвоено)
2. Кирюшин Алексей Валериевич
Старший преподаватель
Кандидат биологических наук, 29.04.2003, МГУ им. М.В. Ломоносова

13. **Краткая аннотация дисциплины:**

Курс дает теоретические основы и практические навыки в использовании методов атомно-эмиссионного, атомно-абсорбционного и масс-спектрометрического анализа при исследовании почв, природных вод и других природных объектов.