

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Б1.В.02.ДВ.04.02 ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЙ ЦИКЛ

Спектроскопические методы анализа

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

04.05.01.32 Аналитическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2020

Красноярск 2022

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ каенд. хим. наук, доцент, Мазняк Н.В.

\_\_\_\_\_ должность, инициалы, фамилия

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель преподавания дисциплины

Целью преподавания дисциплины является: фундаментальная подготовка бакалавров по аналитической химии в области спектроскопических методов химического анализа.

### 1.2 Задачи изучения дисциплины

Основной задачей изучения дисциплины ознакомление студентов с теоретическими и практическими основами, методологией и областями практического применения методов молекулярного и атомного спектроскопического анализа

### 1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
<b>ПК-1: Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</b>	
ПК-1.1: Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	
ПК-1.2: Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	

### 1.4 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

## 2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	е
		1
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>2,5 (90)</b>	
занятия лекционного типа	0,5 (18)	
практические занятия	0,5 (18)	
лабораторные работы	1,5 (54)	
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>1,5 (54)</b>	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

#### 3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
<b>1. 1. Общие положения спектроскопии</b>									

<p>1. Спектроскопические методы анализа, их место и значение в решении актуальных задач современной науки, народного хозяйства, окружающей среды и медицины. Основные этапы развития спектроскопии. Природа электромагнитного излучения. Электромагнитная волна, ее составляющие и характеристики. Свойства электромагнитной волны. Квантовая природа электромагнитного излучения. Постулаты Бора. Основное и возбужденное состояния. Спектроскопические единицы измерения, связь между ними. Шкала электромагнитных волн.</p> <p>Классификации спектров и спектроскопических методов: по объектам анализа, положению в шкале электромагнитных волн, видам движения в молекуле, характеру взаимодействия вещества с электромагнитным излучением. Принципы деления спектроскопических методов анализа на элементный, молекулярный и вещественный (анализ химических форм) анализ.</p>	2							
<p>2. Шкала электромагнитного излучения. Основные характеристики волны. Атомные и молекулярные спектры.</p>			6					
<p><b>2. 2. Основы молекулярной спектроскопии</b></p>								

<p>1. Диаграмма Яблонского. Энергетические уровни молекулы и виды энергетических переходов между ними. Безызлучательные переходы в молекуле: колебательная релаксация, внутренняя и интеркомбинационная конверсия. Радиационные (излучательные) переходы, происхождение спектров поглощения, флуоресценции и фосфоресценции. Синглетные и триплетные состояния молекулы. Скорость энергетических переходов и время жизни возбужденного состояния. Связь энергии перехода и положения полос спектров поглощения, флуоресценции и фосфоресценции в шкале электромагнитных волн. Происхождение спектров комбинационного рассеяния.</p> <p>Классификации электронных спектров поглощения и типов электронных переходов. Критерии отнесения электронных спектров к тому или иному типу перехода: влияние полярности растворителя, заместителя в молекуле, кислотности среды, интенсивность перехода (молярный коэффициент поглощения, сила осциллятора).</p> <p>Химические теории цветности вещества молекулярного строения. Хромофорно-ауксохромная и хиноидная теории. Основные положения электронной теории цветности. Влияние внутри- и межмолекулярных факторов на цвет и электронный спектр.</p> <p>Внутримолекулярные факторы: длина цепи сопряжения; природа заместителя (ЭД- и ЭА- заместители); ионизация заместителей (диссоциация, протонизация); пространственные факторы (свободное вращение, пространственные затруднения); таутомерия; внутримолекулярная водородная связь; термохромизм.</p> <p>Межмолекулярные взаимодействия их проявление в спектрах. Виды межмолекулярных взаимодействий (универсальные и специфические). Межмолекулярная водородная связь и ее проявление в спектрах.</p> <p>Протонодоноры и протоноакцепторы.</p> <p>Комплексообразование органических реагентов с ионами металлов. Гидрофобная гидратация, гидрофобное взаимодействие и их влияние на спектры поглощения реагентов и хелатов металлов с</p>	2							
	7							

2. Виды молекулярных орбиталей и классификация Каша.			2					
3. Взаимодействие с растворителем, эмпирические параметры оценки сольватохромных эффектов и полярности растворителя (Косовера, Димрота-Райхардта, Гутмана, Грюнвальда-Уинстейна, Гильдебранда, Тафта, I1/I3 пирена). Взаимодействие с растворителем в основном и возбужденном состоянии.			2					
<b>3. 3. Основы атомной спектроскопии</b>								
1. Понятие об оптическом электроде и происхождении оптических спектров. Правила отбора, резонансные переходы и соответствующие им линии в спектре. Основные виды взаимодействия электромагнитного излучения с веществом атомного строения и соответствующие методы аналитической атомной спектроскопии: атомно-абсорбционная (ААС), атомно-эмиссионная (АЭС), атомно-флуоресцентная (АФС) рентгено-флуоресцентная (РФЛС) спектрометрия, атомная масс-спектрометрия (АМС), и атомно-ионизационная спектрометрия (АИС), активационный анализ и их современные варианты. Современные возможности физических методов атомного элементного анализа в области полного элементного анализа объекта, определения основы объекта и ультрамикроримесей, локального анализа и анализа поверхности, детектирования единичных атомов. Основные способы атомизации объектов анализа, источники атомизации газов, жидких и твердых проб.		1						



<p>2. Физико-химические процессы, сопровождающие атомизацию вещества и способы устранения влияния окисления и химического состава матрицы. Основные источники электромагнитного излучения и детекторы в атомной спектроскопии. Основные модули приборов атомного элементного анализа.</p>			2					
<p><b>4. 4. Основы фотометрического анализа</b></p>								
<p>1. Основные законы фотометрического анализа и условия их соблюдения. Основные фотометрические формы аналитов. Оптимальные условия фотометрических реакций и их выбор. Выбор светофильтра и аналитической длины волны. Растворители для фотометрии. Оптимальный интервал значений оптической плотности при фотометрических измерениях. Истинные и кажущиеся отклонения от основного закона светопоглощения и их причины. Сравнительная характеристика фотометрических методов определения концентрации вещества в отсутствие мешающих компонентов (определение по среднему значению молярного коэффициента поглощения, по методу сравнения (в двух вариантах), по методу добавок (расчетный и графический), по методу градуировочного графика (с расчетом уравнения по методу наименьших квадратов).</p>	2							

<p>2. Метод фотометрического титрования: типы кривых, индикаторное и безындикаторное титрование, достоинства и недостатки. Погрешность разбавления при титровании, другие виды погрешностей. Дифференциальный метод определения концентрации. Прямое, обратное и полное дифференцирование, факторы пересчета. Способы определения концентрации дифференциальном методом (метод сравнения, градуировочного графика, дифференциальный метод добавок).</p>			2					
<p>3. Дифференциально-фотометрическое определение железа</p>				24				
<p><b>5. 5.Современные варианты фотометрического анализа</b></p>								

<p>1. Спектрофотометрия многокомпонентных систем. Двух(много)волновая и производная спектрофотометрия, лазерная абсорбционная и фотоакустическая спектроскопия, их возможности и области применения. Термооптическая спектрофотометрия. Проточно-инжекционный фотометрический анализ. Твердофазная спектрофотометрия и спектроскопия диффузного отражения. Области применения современных вариантов спектрофотометрии.</p> <p>Пути повышения чувствительности и снижения предела обнаружения фотометрических реакций: инструментально-компьютерное и химическое направления. Химические способы, основанные на изменении природы растворителя, использовании организованных сред на основе мицеллярных систем и молекул-рецепторов, реакциях усиления, образования многокомпонентных систем, каталитических реакциях.</p> <p>Метрологические характеристики фотометрического анализа: чувствительность, предел обнаружения, предел определения, нижняя граница определяемых содержаний. Точность фотометрических методов анализа. Правильность. Проверка правильности шкалы длин волн, шкалы пропускания и оптической плотности. Сходимость и воспроизводимость фотометрического анализа. Кривые Шмидта и Комаря-Самойлова.</p>	2							
<b>6. 6.Люминесцентный анализ</b>								

<p>1. Оптическая схема спектрофлуориметра и ее принципиальное отличие от схемы спектрофотометра. Причины высокой чувствительности люминесцентного анализа. Спектры возбуждения и спектры излучения. Классификации явлений люминесценции: по источнику возбуждения, по длительности послесвечения, классификация Вавилова. Основные закономерности молекулярной люминесценции. Независимость спектра эмиссии от длины волны возбуждающего света. Закон Стокса-Ломмеля. Правило зеркальной симметрии (Левшина). Закон Вавилова. Квантовый и энергетический выходы люминесценции. Природа замедленной флуоресценции, сенсibilизированной флуоресценции и сенсibilизированной фосфоресценции. Природа триплет-триплетной аннигиляции и эффекта антенны. Тушение люминесценции. Уравнение Штерна-Фольмера. Температурное, концентрационное тушение и тушение примесями. Эффект внутреннего фильтра. Влияние растворителя на люминесценцию. Флуоресцентная спектроскопия единичных молекул.</p>	2							
<p>2. Количественный люминесцентный анализ. Основное уравнение люминесцентного анализа. Оценка факторов, определяющих чувствительность люминесцентного анализа. Два направления повышения чувствительности и избирательности люминесцентного анализа: инструментально-компьютерное и химическое. Основные области применения люминесцентного анализа и аппаратура метода.</p>			3					

3. Люминесцентный анализ витаминов					10			
4. Флуориметрическое определение циркония с морином					8			
<b>7. 7. Методы оптической атомной спектроскопии</b>								
1. Принципиальная схема АЭ спектрометра. Правила отбора, резонансные переходы и соответствующие им линии в спектре. Фоновое излучение, факторы, определяющие интенсивность линии в атомном спектре. Методы оптической атомной спектроскопии, основанные на поглощении, эмиссии и флуоресценции атомов, блок-схемы спектральных приборов. Атомно-эмиссионная спектроскопия. Атомизация объектов анализа, источники атомизации газов, жидких и твердых проб. Пламя, назначение горючих газов и газов окислителей. Типы горелок в АЭС, схема плазменной горелки. Различия между пламенем и плазмой, классификация видов плазмы. Виды проб, вносимых в плазму. Дуга, её виды, условия получения, применение. Искра, её виды, электроды, условия получения, применение. Разряды низкого давления, тлеющий разряд и катодное распыление, источники излучения. Лазерно-индуцированная плазма. Основные элементы АЭ спектрометра, разрешение прибора, новые виды детекторов в АЭС.	2							

2. Современная атомно-абсорбционная спектроскопия: новые виды источников излучения и детекторов в ААС, ввод жидких, твердых и газообразных проб. Вариант абсолютной ААС. Зеемановская коррекция фона в ААС. Модификаторы определяемых элементов и матрицы. Атомно-флуоресцентная спектроскопия, её достоинства в сравнении с ААС и АЭС. Источники возбуждения в АФС, метрология метода, области применения.			1					
3. Атомно-абсорбционное определение меди в воде					6			
4. Атомно-абсорбционное определение свинца и никеля в сплавах					6			
<b>8. 8. Методы рентгеновской атомной спектроскопии</b>								
1. Внутренние электроны атомов, энергетические переходы, виды взаимодействия рентгеновского излучения с веществом (поглощение, пропускание, эмиссия, флуоресценция, рассеяние, дифракция). Методы, основанные на рассеянии, поглощении и испускании фотонов: рентгеновская абсорбционная, эмиссионная, флуоресцентная спектроскопия. Рентгеновские методы (EXAFS, SEXAFA, NEXAFS) при определении длин связей, координационных чисел, степеней окисления элементов и ориентации молекул на поверхности.		3						
<b>9. 9. Атомно-ионизационная спектроскопия. Элементная масс-спектрометрия</b>								
1. Принцип, разновидности и преимущества метода. Способы атомизации и получения ионов, ввод пробы. Области применения метода. Метод элементной масс-спектрометрии.		2						
2. изучение теоретического материала							54	

3. Экзамен принимается по вопросам								
Всего	18		18		54		54	

#### **4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины**

**4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):**

1. Microsoft Office Professional Plus 2007.
2. Приложения ChemOffice Ultra 11 - пакет утилит для химиков, таких как: ChemDraw, Chem3D, ChemFinder, ChemACX
- 3.

**4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:**

1. Справочник по химии: основные понятия, термины, законы, схемы, формулы, справочный материал, графики / Л. Н. Блинов, И. Л. Перфилова; Санкт-Петербургский политехнический университет. - Москва: Проспект, 2010. - 155 с.
2. Электронно-библиотечная система Znanium.com предоставляет зарегистрированным пользователям круглосуточный доступ к электронным изданиям из любой точки мира посредством сети Интернет. – Режим доступа: <http://znanium.com/>

#### **5 Фонд оценочных средств**

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

**6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Для чтения лекций используется аудитория, оборудованная мультимедийным оборудованием. Практические занятия проводятся в учебной аудитории с использованием доски.