

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой

**Кафедра органической и
аналитической химии
(ОиАХ_ХМФ)**

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий ОП ВО

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

**Кафедра органической и
аналитической химии
(ОиАХ_ХМФ)**

наименование кафедры

Б.Н. Кузнецов

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЙ ЦИКЛ
СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ
МЕТОДЫ АНАЛИЗА**

Дисциплина Б1.В.01.05 ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЙ ЦИКЛ
Спектроскопические методы анализа

Направление подготовки / 04.04.01 Химия, магистерская программа
специальность 04.04.01.02 Аналитическая химия

Направленность
(профиль)

Форма обучения

очная

Год набора

2020

Красноярск 2021

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

Направление 04.04.01 Химия, магистерская программа 04.04.01.02

Аналитическая химия

Программу
составили

каенд. хим. наук, доцент, Мазняк Н.В.

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

ПК-1н:Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина является вариативной. Для изучения дисциплины «Спектроскопические методы анализа» студентам необходимо усвоить следующие дисциплины:

Пробоотбор и пробоподготовка
Избранные главы аналитической химии

Методы контроля радиационного состояния окружающей среды
Научно - исследовательская работа
Преддипломная практика

1.5 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)	Семестр
		2
Общая трудоемкость дисциплины	4 (144)	4 (144)
Контактная работа с преподавателем:	1,5 (54)	1,5 (54)
занятия лекционного типа	0,5 (18)	0,5 (18)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	0,5 (18)	0,5 (18)
практикумы		
лабораторные работы	0,5 (18)	0,5 (18)
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
Самостоятельная работа обучающихся:	1,5 (54)	1,5 (54)
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
Промежуточная аттестация (Экзамен)	1 (36)	1 (36)

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	1. Общие положения спектроскопии	1	3	0	0	
2	2. Основы молекулярной спектроскопии	3	4	0	0	
3	3. Основы атомной спектроскопии	1	2	0	0	
4	4. Основы фотометрического анализа	2	2	6	0	
5	5. Современные варианты фотометрического анализа	2	0	0	0	
6	6. Люминесцентный анализ	2	3	6	0	
7	7. Методы оптической атомной спектроскопии	2	4	6	0	
8	8. Методы рентгеновской атомной спектроскопии	3	0	0	0	
9	9. Атомно-ионизационная спектроскопия. Элементная масс-спектрометрия	2	0	0	54	
Всего		18	18	18	54	

3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплин ы	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

1	1	<p>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. 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>	1	0	0
---	---	--	---	---	---

	<p> 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- </p>			
--	--	--	--	--

3	3	<p>Понятие об оптическом электроме 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 ультрамикропримесей, локального анализа и анализа поверхности, детектирования единичных атомов. Основные способы атомизации объектов анализа, источники атомизации газов, жидких и твердых проб.</p>	1	0	0
---	---	--	---	---	---

4	4	<p>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	0	0
---	---	---	---	---	---

5	5	2	0	0
---	---	---	---	---

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. 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. Метрологические характеристики фотометрического анализа: чувствительность, предел обнаружения, предел определения, нижняя граница определяемых содержаний. Точность фотометрических методов анализа.

6	6	<p>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	0	0
---	---	--	---	---	---

7	7	<p>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.</p>	2	0	0
---	---	---	---	---	---

8	8	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, SEXAFS, NEXAFS) при определении длин связей, координационных чисел, степеней окисления элементов и ориентации молекул на поверхности.	3	2	0
9	9	Принцип, разновидности и преимущества метода. Способы атомизации и получения ионов, ввод пробы. Области применения метода. Метод элементной масс-спектрометрии.	2	0	0
Всего			18	4	0

3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Шкала электромагнитного излучения. Основные характеристики волны. Атомные и молекулярные спектры.	3	0	0

2	2	Виды молекулярных орбиталей и классификация Каша.	2	0	0
3	2	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	0	0
4	3	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.	2	0	0

5	4	<p>Метод фотометрического титрования: типы кривых, индикаторное и безындикаторное титрование, достоинства и недостатки. Погрешность разбавления при титровании, другие виды погрешностей.</p> <p>Дифференциальный метод определения концентрации. Прямое, обратное и полное дифференцирование, факторы пересчета.</p> <p>Способы определения концентрации дифференциальном методом (метод сравнения, градуировочного графика, дифференциальный метод добавок).</p>	2	0	0
6	6	<p>Количественный люминесцентный анализ.</p> <p>Основное уравнение люминесцентного анализа.</p> <p>Оценка факторов, определяющих чувствительность люминесцентного анализа.</p> <p>Два направления повышения чувствительности и избирательности люминесцентного анализа: инструментально-компьютерное и химическое. Основные области применения люминесцентного анализа и аппаратура метода.</p>	3	0	0

7	7	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.	4	0	0
Всего			18	0	0

3.4 Лабораторные занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	4	Дифференциально-фотометрическое определение железа	6	0	0
2	6	Люминесцентный анализ витаминов	3	0	0
3	6	Флуориметрическое определение циркония с морином	3	0	0
4	7	Атомно-абсорбционное определение меди в воде	3	2	0
5	7	Атомно-абсорбционное определение свинца и никеля в сплавах	3	2	0
Всего			18	4	0

5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

7 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Э1	Научная Электронная Библиотека e-LIBRARY.RU.	http://elibrary.ru/
Э2	Nature Publishing Group – годовая подписка на научные электронные журналы издательства Nature Publishing Group: Nature Materials, Nature Nanotechnology.	http://www.nature.com
Э3	EBSCO Journals (компания EBSCO Publishing)	http://search.ebscohost.com
Э4	Cambridge University Press	http://www.journals.cambridge.org
Э5	Royal Society of Chemistry	http://www.rsc.org
Э6	Elsevier - доступ к Freedom Collection издательства Elsevier	http://www.sciencedirect.com
Э7	Электронная химическая энциклопедия – он-лайн	http://www.xumuk.ru/encyklopedia/
Э8	Сайт по применению методов математической статистики и теории вероятностей в аналитической химии для обработки результатов аналитических измерений	http://chemstat.com.ru/

8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Самостоятельная работа реализуется через изучение теоретического материала по литературе, рекомендуемой лектором после каждой лекции, и решение задач, выдаваемых преподавателем на практических занятиях.

9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

9.1 Перечень необходимого программного обеспечения

9.1.1	Microsoft Office Professional Plus 2007.
9.1.2	Приложения ChemOffice Ultra 11 - пакет утилит для химиков, таких как: ChemDraw, Chem3D, ChemFinder, ChemACX
9.1.3	

9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	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.
9.2.2	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/

10 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.