

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.02.ДВ.05.02 ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЙ ЦИКЛ
Спектроскопические методы анализа

Направление подготовки /
специальность

Направленность
(профиль)

Форма обучения

Год набора

очная

2019

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)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, специализация

04.05.01.31 Физическая 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-5:Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования физико-химических свойств полифункциональных материалов

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 |
|--|--|-----------------|
| | | 7 |
| Общая трудоемкость дисциплины | 4 (144) | 4 (144) |
| Контактная работа с преподавателем: | 2,5 (90) | 2,5 (90) |
| 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 | 1,5 (54) | 1,5 (54) |
| 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 (Зачёт) | | |

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 | 2 | 5 | 0 | 0 | |
| 2 | 2. Основы молекулярной спектроскопии | 2 | 4 | 0 | 0 | |
| 3 | 3. Основы атомной спектроскопии | 1 | 2 | 0 | 0 | |
| 4 | 4. Основы фотометрического анализа | 2 | 2 | 12 | 0 | |
| 5 | 5. Современные варианты фотометрического анализа | 2 | 0 | 0 | 0 | |
| 6 | 6. Люминесцентный анализ | 2 | 3 | 14 | 0 | |
| 7 | 7. Методы оптической атомной спектроскопии | 2 | 2 | 28 | 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 | 54 | 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> | 2 | 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, SEXAFA, NEXAFS) при определении длин связей, координационных чисел, степеней окисления элементов и ориентации молекул на поверхности. | 3 | 0 | 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 | 0 | 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. | 5 | 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. | 2 | 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 | 12 | 0 | 0 |
| 2 | 6 | Люминесцентный анализ витаминов | 8 | 0 | 0 |
| 3 | 6 | Флуориметрическое определение циркония с морином | 6 | 0 | 0 |
| 4 | 7 | Атомно-абсорбционное определение меди в воде | 16 | 0 | 0 |
| 5 | 7 | Атомно-абсорбционное определение свинца и никеля в сплавах | 12 | 0 | 0 |
| Всего | | | 54 | 0 | 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.