

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана химического факультета
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Спектральные методы диагностики материалов

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
Химия современных материалов и технологий

Форма обучения
Очная

Квалификация
химик-исследователь

Год приема
2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
А.С. Князев

Председатель УМК
Л.Н. Мишенина

Томск – 2024

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных научных приборов.

ОПК-2 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальные и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.

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

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 1.1 Знает основные теоретические положения, экспериментальные и расчетные методы, применяемые в выбранной области химии

ИОПК 1.2 Знает теоретические основы инструментальных методов исследования веществ для грамотного планирования научного исследования

ИОПК 1.3 Умеет применять существующие и разрабатывать новые методики получения и характеристики веществ и материалов

ИОПК 1.4 Умеет использовать современное научное оборудование, расчетно-теоретические методы и профессиональное программное обеспечение для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ИОПК 2.1 Знает основные требования к методам обработки и представления результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

ИОПК 2.2 Умеет анализировать, интерпретировать и обобщать данные, представленные в литературе и полученные в результате проведенных исследований в избранной области химии или смежных наук

ИПК 1.2 Умеет выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов

ИПК 1.3 Умеет использовать современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования

ИПК 1.4 Умеет проводить поиск, анализировать и обобщать результаты патентного поиска по тематике исследовательской работы

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить аппарат основных спектроскопических методов исследования и их физические основы.

– Научиться применять понятийный аппарат методов спектроскопии для самостоятельного выбора метода исследования, подготовки образцов, проведения измерений и интерпретации результатов для решения практических задач профессиональной деятельности.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Первый семестр, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Физика, Физическая химия и Строение вещества.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

-лекции: 16 ч.

-практические занятия: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Теоретические основы методов анализа, основанных на взаимодействии атомов и молекул с излучением. Виды излучения и его характеристики. Основные виды переходов в молекулах. Классификация методов исследования на основе видов первичного и вторичного пучка, на основе энергий зондирующих частиц и по характеру взаимодействий зондирующих пучков и полей с веществом.

Тема 2. ИК- и КР-спектроскопия, теоретические основы и практические аспекты применения. Теоретические основы колебательной спектроскопии. Основные типы колебаний и соответствующие им области спектра. Основные элементы ИК-спектрометра, ИК-фурье спектрометр. Техника эксперимента. Спектроскопия диффузного отражения и нарушенного полного внутреннего отражения в ИК-области. Анализ ИК-спектров.

Основы эффекта комбинационного рассеяния. Устройство спектрометра КР. Применение метода КР. Определение структуры молекулы по данным ИК-спектроскопии и спектроскопии КР.

Тема 3. Спектроскопия видимой и ультрафиолетовой области. Поглощающие свойства молекул. Основные электронные переходы. Комплексы с переносом заряда. Комплексы переходных металлов. Плазмонное поглощение. Природа света.

Оптика в спектроскопии. Физические световые единицы. Фотометрические световые единицы. Источники света. Геометрическая и волновая оптика. Монохроматоры. Фотодетекторы. Устройство спектрометра, техника УФ-спектроскопии. Исследование мутных и рассеивающих образцов. Сфера Ульбрихта. Спектроскопия диффузного отражения, преобразование Кубелки-Мунка.

Тема 4. Люминесцентный анализ (ЛА). Определение понятия люминесценции, основные закономерности люминесценции растворов. Люминесценция веществ и их химическая структура. Систематизация методов ЛА. Устройство прибора. Флуоресцентные индикаторы. Люминесцентный анализ в химии. Хемилюминесценция и ее использование в ЛА. Катодо- и рентгенолюминесценция.

Тема 5. *Ex situ* и *in situ* эксперименты в колебательной спектроскопии. Определение адсорбционных мест, определение кислотности или основности (молекулы-зонды). Эксперименты в вакууме, при низких и высоких температурах. Комбинация спектроскопических исследований (ИК, КР) с одновременной регистрацией реагентов и продуктов.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения тестов по лекционному материалу, проведению практического исследования свойств материалов, используемых в магистерской диссертации с интерпретацией результатов и защитой отчета и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет во втором семестре проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит теоретический вопрос и две задачи. Продолжительность зачета 1,5 часа.

Примерный перечень теоретических вопросов

1. Вопрос 1. Устройство Фурье-спектрометра
2. Вопрос 2. Спектроскопия диффузного отражения
3. Вопрос 3. Физические основы комбинационного рассеяния света

Примеры задач:

1. Задача 1. Определение состава продуктов отжига органических объектов. Требуется: обосновать выбор спектроскопического метода исследования.
 2. Задача 2. Определение состава полимерной смеси. Требуется: обосновать выбор метода исследования и способ интерпретации результатов.
 3. Задача 3. Исследования процесса сорбции щавелевой кислоты на ZnO *in situ*. Требуется: описать метод исследования и методику измерений.
- Результаты зачета определяются оценками «зачтено», «не зачтено».

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/enrol/index.php?id=26850>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по проведению лабораторных работ.
- д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов / В. Шмидт – М : Техносфера, 2007. – 368 с.
 - Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. Пер. с англ./ К. Бенуэлл – М : Мир, 1985. – 384 с.
 - Пентин Ю. А. Основы молекулярной спектроскопии/ Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина М. : Мир БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 398 с.
 - Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии/ Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков – М : Мир «ООО Издательство АСТ», 2003. – 683 с.
 - Юинг Г. Инструментальные методы химического анализа: Пер. с англ. / Г. Юинг – М. : Мир, 1989.
 - Кизель В. А. Отражение света / В. А. Кизель – М. : Наука, 1973. – 351 с.
 - Кубелка П. Спектроскопия отражения (Теория, методы, техника) / П. Кубелка. - М. : Мир, 1978.
- б) дополнительная литература:
 - Stuart B. Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications / New York John Wiley & Sons, 2004. – 228 p.

- Richard L. Raman spectroscopy for chemical analysis / L. Richard, New York John Wiley & Sons. 2000. – 420 p.
- Лебедева В.В. Инструментальная оптика/ В.В. Лебедева – М. Физ. фак-т МГУ им. М. В. Ломоносова, 2005. – 282 с.
- Харрик Н. Спектроскопия внутреннего отражения/ Н. Харрик - М.: Мир, 1970.
- Золотарев В.М. Разработка методов и техники спектроскопии НПВО// Оптич. журнал. 2000, Т.64, N4, С.12-16.
- Золотарев В.М., Тарасевич Б.Н., Лыгин В.И. Спектры внутреннего отражения поверхностных соединений и адсорбированных молекул// Успехи химии. 1981, №1, с.24.

в) ресурсы сети Интернет:

- Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000- . – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp>;
- SpringerLink [Electronic resource] / Springer International Publishing AG, Part of Springer Science+Business Media. – Electronic data. – Cham, Switzerland, [s. n.]. – URL: <http://link.springer.com/>;
- ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>;
- Google Scholar [Electronic resource] / Google Inc. – Electronic data. – [S. l. : s. n.]. – URL: <http://scholar.google.com/>.
- Информационно-аналитическая платформа компании Clarivate Analytics – <https://www.webofscience.com>.

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
 - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Лаборатория, оборудованная УФ-вид, ИК- и КР-спектрометрами.

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Изаак Татьяна Ивановна, канд. хим. наук, доцент, кафедра аналитической химии
Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.