

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ
Директор института химии
д.х.н., проф. Федотова О.В.

"10" сентября 2019 г.

Рабочая программа дисциплины

Спектроскопические методы анализа и исследования





Направление подготовки бакалавриата
04.03.01 Химия

Профиль подготовки бакалавриата
Аналитическая химия и химическая экспертиза

Квалификация (степень) выпускника
Бакалавр

Форма обучения
очная

Саратов,
2019

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Штыков Сергей Николаевич		10.09.2019
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна		10.09.2019
Заведующий кафедрой	Русанова Татьяна Юрьевна		10.09.2019
Специалист Учебного управления	Зими́на Елена Валерьевна		10.09.2019

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Спектроскопические методы анализа и исследования» является формирование у будущего специалиста компетенций, связанных с пониманием принципов и роли, которую играют современные методы атомной и молекулярной спектроскопии в качественном и количественном анализе природных, промышленных веществ и материалов, оценке состояния объектов окружающей среды и живой материи и, в связи с этим, решении современных ключевых технологических проблем промышленности, экологии и качества жизни. В итоге бакалавр должен на основании использования фундаментальных химических понятий аналитической химии и химического анализа, а также конкретных знаний в области спектрометрических методов анализа уметь выбирать спектроскопические методы и средства контроля качества и химического состава природных и промышленных неорганических, органических и биологических объектов, уметь представить и обосновать свой выбор, используя полученные знания и различные другие источники информации.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Спектроскопические методы анализа и исследования» (Б1.В.ДВ.06.02) относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 «Дисциплины (модули)» рабочего учебного плана ООП по направлению 04.03.01 Химия, профилю «Аналитическая химия и химическая экспертиза», является дисциплиной по выбору и изучается в 8 семестре.

Учитывая место данной дисциплины в учебном плане (4 курс, 8 семестр), данный курс обеспечивает содержательную взаимосвязь естественнонаучных дисциплин с профессиональными дисциплинами профиля подготовки «Аналитическая химия и химическая экспертиза». Материал дисциплины базируется на знаниях по физике (раздел спектроскопия), физической, аналитической, неорганической, органической химии, методам математической статистики в химии в объеме курсов ООП по направлению подготовки «Химия».

Для успешного освоения данного курса студенты должны обладать следующими «входными» знаниями, умениями и готовностями:

знать физические основы спектроскопии, строение и свойства атомов и молекул, основы спектрометрических методов, полученные в ходе изучения дисциплины «Аналитическая химия», способы выражения концентрации растворов;

владеть: основными навыками работы по классическим и физическим методам анализа: титриметрии, молекулярной и атомной спектрометрии;

уметь переходить от одного вида концентрации к другому, проводить полную статистическую обработку результатов анализа, оценивать правильность полученных результатов, строить градуировочный график и вычислять его параметры. Данная дисциплина является основой для последующего выполнения выпускной квалификационной работы.

Умения, приобретенные в рамках дисциплины «Спектроскопические методы анализа и исследования», необходимы в научной работе для выявления фундаментальных закономерностей природы «состав - свойство», «состав - качество объекта» «состав - биологическая активность препарата» и для практического контроля качества выпускаемой продукции или состояния (загрязнения) объектов окружающей среды (вода, воздух, почва, растения), медицины, а также умения применять полученные навыки в последующих вариативных курсах и преддипломной практике в 8 учебном семестре.

3. Результаты обучения по дисциплине

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
<p>ПК-1: Владеет системой фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>ПК-1.1. Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования.</p> <p>ПК-1.2. Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности</p> <p>ПК-1.3. Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин</p>	<p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - теоретические основы спектрометрических методов анализа; - области применения и возможности спектрометрических методов в анализе различных объектов и исследовании химических реакций и процессов; <p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - выбирать варианты спектрометрических методов анализа в зависимости от объекта и определяемого вещества; <p>владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - приемами работы на серийных приборах спектрометрического анализа, расчета полученных результатов и их статистической

		обработки.
<p>ПК-5. Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения под руководством специалистов более высокой квалификации</p>	<p>ПК-5.1. Выбирает методы и средства контроля качества, сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения на соответствие требуемой нормативной документации</p> <p>ПК-5.2. Выполняет стандартные операции на типовом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства.</p> <p>ПК-5.3. Составляет протоколы испытаний, отчеты о выполненной работе по заданной форме</p> <p>ПК-5.4. Осуществляет контроль точности аналитического оборудования на соответствие требуемой нормативной документации</p>	<p>знать: - приемы и методы подготовки проб объектов к анализу, стандартные операции разделения и концентрирования перед определением;</p> <p>- потенциальные возможности отдельных методов атомной и молекулярной спектроскопии, касающиеся интервала определяемых концентраций, селективности определения тем или иным методом;</p> <p>уметь:</p> <p>- выбирать конкретную методику анализа и адаптировать её к анализируемому объекту и определяемому веществу;</p> <p>владеть:</p> <p>- вспомогательными инструментами и операциями при подготовке проб к анализу;</p> <p>- составлять протоколы испытаний и анализа и готовить отчеты по стандартной форме;</p> <p>- оценивать соответствие точности метода анализа требованиям заказчика.</p>

4. Структура и содержание дисциплины.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов (18 часов лекц., 50 часов лаб., 40 часов – самостоятельная работа). Форма отчетности – зачет в 8 семестре.

№ п/п	Раздел дисциплины	Се мес тр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости Формы промежу- точной аттестации
				лек- ции	лабо- - рато р- ные	СР	всег о	
1	Общие положения и классификации в спектроскопии	8	1	2	2	6	10	Выборочный опрос, отчет по лаб. работам
2	Основные положения молекулярной спектроскопии	8	2	2	6	4	12	Разбор конкретных ситуаций отчет по лаб. работам
3	Спектрофотометрия	8	3	2	6	4	12	Коллоквиум, отчет по лаб. работам
4	Основные положения атомной спектрометрии.	8	4	2	6	4	12	Тестирование, отчет по лаб. работам
5	Современные варианты атомно-абсорбционной спектрометрии	8	5	2	6	4	12	Контрольная работа, отчет по лаб. работам
6	Сравнительная характеристика методов атомно-эмиссионной (ИСП-АЭС) и атомной масс-спектрометрии (ИСП-МС)	8	6	2	6	4	12	Разбор конкретных ситуаций отчет по лаб. работам
7	Основы и применение рентгено-флуоресцентной спектрометрии	8	7	2	6	4	12	Выборочный опрос отчет по лаб. работам
8	Применение спектрометрии в анализе поверхности: фотонно-зондовые и электронно-зондовые методы	8	8	2	6	4	12	Коллоквиум, отчет по лаб. работам
9	Ионно-зондовые и полевые зондовые методы анализа поверхности и наноматериалов	8	9	2	6	6	14	Реферат, отчет по лаб. работам
	Промежуточная аттестация	8						Зачет
	Итого			18	50	40	108	

Содержание дисциплины

ОСНОВЫ СПЕКТРОСКОПИИ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

1. *Общие положения и классификации в спектроскопии.*

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. Атомные и молекулярные спектры. Принципы деления спектроскопических методов анализа на элементный, молекулярный и вещественный (химические формы) анализ.

2. *Основные положения молекулярной спектроскопии.* 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.

Классификация электронных переходов Каша. 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).

Основные положения электронной теории цветности. Влияние внутри- и межмолекулярных факторов на цвет и электронный спектр. *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. *Межмолекулярные взаимодействия* их проявление в спектрах. Виды межмолекулярных взаимодействий (универсальные и специфические). Взаимодействие с растворителем, эмпирические параметры оценки сольватохромных эффектов и полярности растворителя (Косовера, Димрота-Райхардта, Гутмана, Грюнвальда-Уинштейна, Гильдебранда, Тафта,

I₁/I₃ пирена). Взаимодействие с растворителем в основном и возбужденном состоянии. Межмолекулярная водородная связь и ее проявление в спектрах. Комплексообразование органических реагентов с ионами металлов. Гидрофобная гидратация, гидрофобное взаимодействие и их влияние на спектры поглощения реагентов и хелатов металлов с органическими реагентами. Солюбилизация в мицеллярных системах, молекулы-рецепторы и образование комплексов «гость-хозяин».

Вероятность электронного перехода, правила отбора. Интеркомбинационный и альтернативный запреты. Характеристики электронного спектра. Современные возможности методов молекулярной абсорбционной и люминесцентной спектроскопии при обнаружении, идентификации и определении неорганических и органических веществ.

3. Спектрофотометрия

Современные методы спектрофотометрии. Спектрофотометрия многокомпонентных систем. Двух(много)волновая, производная термооптическая, спектрофотометрия, лазерная абсорбционная и фотоакустическая спектроскопия, твердофазная спектрофотометрия и спектроскопия диффузного отражения. их возможности и применение. Проточно-инжекционный фотометрический анализ. 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.

4. Основные положения атомной спектроскопии. 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. 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.

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.

ОСНОВЫ МЕТОДОВ АТОМНОГО (ЭЛЕМЕНТНОГО) СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

5. Современные варианты атомно-абсорбционной спектроскопии.

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.

6. Сравнительная характеристика методов атомно-эмиссионной (ИСП-АЭС) и атомной масс-спектрометрии (ИСП-МС). Атомизация пробы для 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. Характеристика метода ИСП-АЭС. Метод атомной масс-спектрометрии с индукционно-связанной плазмой (ИСП-МС). Сравнительная характеристика аналитических возможностей методов атомно-эмиссионной (ИСП-АЭС) и атомной масс-спектрометрии (ИСП-МС)

7. Основы и применение рентгено-флуоресцентной спектроскопии.

Атомно-флуоресцентная спектроскопия, её достоинства в сравнении с ААС и АЭС. Источники возбуждения в АФС, метрология метода, области применения.

8. Применение спектроскопии в анализе поверхности: фотонно-зондовые и электронно-зондовые методы. 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. Основы, аналитические возможности и применение рентгено-флуоресцентной спектроскопии.

9. Ионно-зондовые и полевые зондовые методы анализа поверхности и наноматериалов. Основы и сравнительная характеристика ионно-зондовых и полевых зондовых методов анализа поверхности и состава наноматериалов.

Практическое применение методов атомной спектроскопии в анализе газов, жидких, твердых тел, анализе поверхности и локальном анализе.

5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины

Наряду с традиционными образовательными технологиями широко используются технологии, основанные на методах научно-технического творчества и современных информационных средствах, включающие, в том числе, обучение на основе дискуссий, интеллектуальных тренажеров, ролевых игр, разбор конкретных ситуаций, возможность подготовки презентаций по тем или иным темам, а также систем обучения профессиональным навыкам и умениям. Предусмотрены встречи с представителями производственных аналитических лабораторий спектроскопического профиля.

Планируется проведение обсуждений и дискуссий по выбору методов исследования конкретных объектов, коллоквиумы, разбор конкретных ситуаций, защита результатов исследовательской работы по анализу персонального объекта, отобранного и изученного самостоятельно под руководством преподавателя.

Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах, определяется главной целью (миссией) программы, особенностью контингента обучающихся и содержанием конкретных дисциплин, и в целом в учебном процессе они должны составлять не менее 30% аудиторных занятий (*определяется требованиями ФГОС с учетом специфики ООП*). Занятия лекционного типа для соответствующих групп студентов не могут составлять более 40% аудиторных занятий (*определяется соответствующим ФГОС*).

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предоставляется возможность дистанционного освоения её теоретической части путем распространения текста лекций, заданий и их контроля через интернет, а также индивидуальных консультаций с применением как электронной почты, так и визуального общения с использованием интернет-технологии «Скайп».

Перечень лабораторных работ, проводимых в варианте исследовательских работ с индивидуальным объектом, самостоятельно отобранным и подготовленным студентом:

1. Приготовление исходных и рабочих стандартных растворов хромофорных индикаторов и органических реагентов и получение их электронных спектров поглощения в воде и органических растворителях.

2. Расчет основных характеристик электронного спектра (положения максимума, молярного коэффициента светопоглощения, полуширины, фактора асимметрии, интегральной интенсивности, силы осциллятора).
3. Определение типа электронного перехода при возбуждении молекулы (по величине $\epsilon_{\text{мол}}$, силе осциллятора, влиянию растворителя, кислоты и заместителя в молекуле).
4. Анализ многокомпонентных систем на примере смеси катионных красителей.
5. Приготовление серии буферных растворов и растворов кислотно-основных индикаторов.
6. Спектрофотометрическое изучение и расчет константы диссоциации индикаторов кислотного и основного характера алгебраическим методом.
7. Приготовление стандартных растворов флуоресцеина и исследуемого флуорофора в различных водных и неводных растворителях и снятие их спектров поглощения и спектров флуоресценции.
8. Расчет квантового выхода флуоресценции флуорофора, величины стока сдвига и графическая оценка подчинимости спектров поглощения и флуоресценции люминофоров правилу зеркальной симметрии Лёвшина.
9. Компьютерная идентификация компонентов смесей органических соединений по банкам данных масс-спектров при выполнении хроматомасс-спектрометрического анализа смесей органических соединений.

Результаты проведенных исследований конкретных объектов разбираются в варианте разбора конкретных ситуаций на общей дискуссии группы и проводится сопоставление полученных результатов теоретическим положениям, причины возможных несоответствий и сложных ситуаций в спектрометрическом анализе конкретных природных и промышленных объектов или биологических проб с привлечением соответствующих специалистов в спектроскопии. Рассматриваются возможности использования компьютерного моделирования для решения конкретных задач качественного и количественного анализа смесей спектроскопическими методами.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Самостоятельная работа студентов предполагает освоение теоретического материала, подготовку к лабораторным работам, оформление лабораторного журнала, подготовку к текущему и итоговому контролю. Форма итогового контроля – зачет.

Самостоятельная работа студентов включает:

- подготовку теоретических основ спектроскопии и конкретных спектрометрических методов анализа к устному отчету, контрольным работам или письменному опросу по применению теории для расчета концентраций по результатам анализа конкретных объектов;

- подготовку к защите рефератов с представлением презентаций, раскрывающих основные положения методов молекулярной и атомной спектроскопии;

- оформление результатов лабораторных работ, расчеты концентраций определяемых веществ, построение спектров и подготовку к отчетам по лабораторным работам.

- поиск в сети Интернет информации о современных спектроскопических приборах на сайтах российских и зарубежных компаний и определение параметров, по которым необходимо проводить сравнение их возможностей.

Для самостоятельной работы студентов в научной библиотеке СГУ имеется современная учебно-методическая литература, отраженная в электронном каталоге библиотеки, доступном в сети Интернет.

Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины включают:

- тестирование и контрольные работы двух типов (по усвоению теоретического материала и его применению для решения задач, моделирующих использование теории для расчета концентраций при различных фотометрических определениях);

- устный отчет по теории метода и отчет по лабораторной работе с разбором конкретных ситуаций, возникающих при реализации методов молекулярной и атомной спектроскопии;

- подготовку и защиту рефератов с представлением презентации, иллюстрирующей фундаментальные основы, достоинства, недостатки и применение конкретного спектроскопического метода для анализа различных объектов;

- два коллоквиума, в которых суммируются теоретические и практические знания по молекулярной и атомной спектроскопии;

- встречи со специалистами (в том числе экскурсии в современные лаборатории) по отдельным видам спектроскопии, для развития профессиональных навыков и знакомства с возможностями современной спектроскопии в анализе различных объектов окружающей среды, промышленного производства и медицины.

Вопросы

для самостоятельной работы студентов по дисциплине «Спектроскопические методы анализа и исследования»

1. Спектроскопия и спектрометрические методы анализа, их сущность и классификации.
2. Величины, характеризующие электромагнитное излучение, связь между ними. Происхождение электромагнитного излучения. Постулаты Бора. Основное и возбужденное состояния атомов и молекул.

3. Энергетические переходы в атомах и молекулах, соответствующие им спектры. Диаграмма Яблонского.
4. Радиационные и безызлучательные переходы. Время жизни возбужденного состояния.
5. Правила отбора при электронных переходах, интеркомбинационный и альтернативный запреты.
6. Синглетное и триплетное состояния молекул, интеркомбинационная конверсия и факторы, влияющие на её вероятность.
7. Классификация электронных переходов Каша.
8. Связь типа перехода, его интенсивности и положения полосы поглощения в спектре.
9. Критерии отнесения полос к $n \rightarrow \pi^*$ и $\pi \rightarrow \pi^*$ типам переходов.
10. Параметры, характеризующие полосу поглощения $\epsilon_{\text{мол.}}$, $\lambda_{\text{макс.}}$, интегральная интенсивность, сила осциллятора, полуширина полосы, фактор асимметрии.
11. Химические теории цветности
12. Электронная теория цветности (Измаильский), ее основные положения.
13. Электронодонорные и электроноакцепторные заместители, их влияние на положение полосы поглощения. Полосы переноса заряда.
14. Внутримолекулярные и межмолекулярные факторы, влияющие на положение полосы в спектре.
15. Внутримолекулярные взаимодействия: диссоциация, протонизация, положение и тип заместителя, внутримолекулярная водородная связь, таутомерия, термохромизм, пространственные факторы.
16. Типы межмолекулярных взаимодействий в растворе: водородная связь, гидрофобное взаимодействие, комплексообразование с ионами металлов.
17. Влияние растворителя, эмпирические шкалы полярности растворителей.
18. Влияние организованных сред.
19. Основные оптические величины (пропускание, коэффициент пропускания, оптическая плотность, молярный коэффициент поглощения).
20. Законы поглощения света, отклонения от основного закона поглощения света (истинные и кажущиеся).
21. Классификация кажущихся отклонений от основного закона поглощения света.
22. Аддитивность оптической плотности. Анализ многокомпонентных систем.
23. Выбор оптимальных условий измерения сигнала в молекулярной спектроскопии (выбор светофильтра, длины волны измерения).
24. Метрологические характеристики фотометрического анализа: коэффициент чувствительности, предел обнаружения, НГОС.
25. Способы повышения чувствительности и снижения предела обнаружения в молекулярной спектроскопии: инструментально-компьютерные и химические.
26. Современные методы спектрофотометрии: двухволновая, производная, лазерная, акустическая.

27. Люминесцентный анализ. Оптическая схема люминесцентного прибора, её отличие от схемы фотометра. Классификации люминесценции.
28. Основные законы и закономерности люминесценции.
29. Тушение люминесценции и его виды.
30. Основное уравнение люминесценции, способы снижения предела обнаружения в люминесценции. Области применения люминесценции.
31. Классификация методов атомной спектроскопии, основанная на поглощении и излучении света и энергии электронного перехода. Виды взаимодействия света с веществом атомного строения и соответствующие им методы анализа.
32. Современные варианты метода атомно-эмиссионной спектроскопии, их возможности, области применения. Индукционно-связанная плазма как метод анализа и метод детектирования в разделении и концентрировании.
33. Современные варианты атомно-флуоресцентной спектроскопии и их места в анализе жидких и твердых объектов.
34. Современные варианты методов рентгеновской спектроскопии. Рентгенофлуоресцентная спектроскопия и её применение для анализа жидких и твердых проб.
35. Атомно-спектроскопические методы, основанные на поглощении света, их особенности, виды, преимущества и недостатки по отношению к эмиссионным методам. Сравнение возможностей пламенной и электротермической атомно-абсорбционной спектроскопии.
36. Атомно-ионизационные методы анализа. Способы ионизации атомов и молекул.
37. Атомный масс-спектрометрический анализ и его применение в анализе объектов окружающей среды и анализе высокочистых веществ.
38. Практическое применение спектроскопических методов в анализе объектов окружающей среды, промышленности, том числе химической, фармацевтической и пищевой, сельского хозяйства, медицины и космоса.
39. Оптические сенсоры, их виды и применение.

**Темы рефератов для самостоятельной работы студентов по курсу
«Спектроскопические методы анализа и исследования»**

1. Методы оптической атомной спектроскопии, происхождение атомных спектров поглощения, эмиссии и флуоресценции, их характеристики.
2. Сравнительная характеристика источников атомизации вещества и света в оптической атомной спектроскопии.
3. Виды регистрации спектра в оптической атомной спектроскопии.
4. Оптическая схема и основные характеристики приборов оптической атомной спектроскопии.
5. Атомно-эмиссионный спектральный анализ с индукционно-связанной плазмой.
6. Атомно-абсорбционный анализ газов, жидкостей и твердых тел.

7. Атомно-флуоресцентный спектральный анализ.
8. Методы спектроскопии, основанные на взаимодействии вещества с рентгеновским излучением, происхождение спектров поглощения, эмиссии, рассеяния, вторичных рентгеновских электронов (фотоэлектронных и оже-электронов).
9. Рентгенофлуоресцентный анализ: спектрометры с энергетической и волновой дисперсией.
10. Рентгено-абсорбционный анализ, преимущества и недостатки.
11. Рентгено-эмиссионный анализ: место среди других рентгеновских методов.
12. Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.
13. Метод оже-спектроскопии для анализа поверхности.
14. Метод атомной масс-спектрометрии, области применения

7. Данные для учета успеваемости студентов в БАРС

Таблица 1.1 Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности.

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Семестр	Лекции и	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация	Итого
8	18	36	0	16	0	0	30	100

Программа оценивания учебной деятельности студента

Семестр 8

Лекции

0-18 баллов (оценивается посещаемость и работа на лекции, 1 балл за час)

Лабораторные занятия

0-36 баллов (9 лабораторных работ, по 4 балла максимум за каждую; оценивается: знание теоретических основ лабораторной работы - 1 балл, самостоятельность при выполнении работы - 1 балл, грамотность в оформлении лабораторной работы - 1 балл, правильность выполнения химических операций - 1 балл).

Практические занятия

Не предусмотрено

Самостоятельная работа

0-16 баллов (оценивается подготовка к лабораторным работам – максимум 8 баллов, реферат – максимум 10 баллов)

Автоматизированное тестирование

Не предусмотрено

Другие виды учебной деятельности

Не предусмотрено

Промежуточная аттестация

0-30 баллов

Промежуточная аттестация проводится в виде устного зачета:

ответ на «отлично» / «зачтено» оценивается от 25 до 30 баллов;

ответ на «хорошо» / «зачтено» оценивается от 18 до 24 баллов;

ответ на «удовлетворительно» / «зачтено» оценивается от 11 до 17 баллов;

ответ на «неудовлетворительно» / «не зачтено» оценивается от 0 до 10 баллов.

Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за 8 семестр по дисциплине «Спектроскопические методы анализа и исследования» составляет 100 баллов.

Таблица 2.1. Таблица пересчета полученной студентом суммы баллов по дисциплине «Спектроскопические методы анализа и исследования» в оценку (зачет):

Сумма баллов, набранных студентом по итогам изучения дисциплины	0-54 баллов	55-100 баллов
зачет	«не зачтено»	«зачтено»

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) литература:

1. Основы молекулярной спектроскопии [Текст] : учеб. пособие / Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина. - Москва : Мир : БИНОМ. Лаб. знаний, 2008. - 398 с. (56 экз.)
2. Методы спектрофотометрии в УФ и видимой области в неорганическом анализе / З. Марченко, М Бальцежак. Пер с польск. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. – 711 с. (10 экз.)
3. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа. / Под ред. А.А. Ищенко. В 2 томах. Том 2. Изд-во “Академия”. 2010. - 416 с. (5 экз.)

б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Microsoft Office 2010

<http://www.technosphaera.ru>

http://window.edu.ru/window/catalog?p_rid=4803 образовательный портал

«Аналитическая химия» http://www.wssanalytchem.org/default.aspx__.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Оверхед-проектор и прозрачные пленки
2. Мультимедийный проектор и компьютер
3. Спектрофотометр «Шимадзу» UV-1800
4. Люминесцентный спектрофотометр «Шимадзу» RF 5301
5. Фотометры КФК
6. Кюветы
7. Мерная посуда, пипетки, дозаторы
8. Реактивы, растворители, буферные растворы
9. Программное обеспечение

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 04.03.01 «Химия» и профилю подготовки «Аналитическая химия и химическая экспертиза».

Автор засл. деятель науки, д.х.н., профессор

Штыков С.Н.

Программа одобрена на заседании кафедры аналитической химии и химической экологии от 10 сентября 2019 года, протокол № 2.