

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

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Методы исследования многокомпонентных систем

Модуль 1. ИК-спектроскопия

по направлению подготовки / специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) подготовки / специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

химик-специалист, преподаватель

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений в различных областях химии.

ОПК-2. Способен проводить синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследовать процессы с их участием.

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

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК 1.1 Знает теоретические основы неорганической, органической, физической и аналитической химии, применяет их при решении профессиональных задач в других областях химии.

РООПК 1.2 Умеет систематизировать и интерпретировать результаты экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.

РООПК 1.3 Умеет грамотно формулировать заключения и выводы по результатам работы.

РООПК 2.2 Знает теоретические основы методов изучения состава, структуры и свойств для грамотного выбора метода исследования.

РООПК 2.3 Умеет проводить стандартные синтезы по готовым методикам, выполнять стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов, а также использовать серийное научное оборудование для изучения их свойств.

РОПК 1.1 Умеет разрабатывать стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

РОПК 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.

2. Задачи освоения дисциплины

– сформировать у студентов представления об основах ИК-спектроскопии, областях применения на практике, принципах устройства и работы спектрометров различного вида, подходах к пробоподготовке, интерпретации спектров и количественному анализу;

– научить проводить исследование образцов многокомпонентных систем методом ИК-спектроскопии с соблюдением норм техники безопасности: владеть навыками пробоподготовки; съемки спектров и интерпретации полученных результатов;

– научить выбирать подход к анализу методом ИК-спектроскопии образцов в различном агрегатном состоянии, оптимизировать условия анализа при решении практических задач.

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. Дисциплина входит в модуль «Неорганическая химия и химическое материаловедение».

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

Восьмой семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Физическая химия», «Строение вещества».

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых данному модулю «ИК – спектроскопия» 2 з.е., 72 часа:

- лекции: 16 ч.

- лабораторные: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Введение. Основы инфракрасной спектроскопии.

Область оптических спектров. Поглощение ИК излучения веществом. Основные положения теории колебательных спектров. Колебания и спектры двух- и многоатомных молекул. Вращательные и колебательные спектры. Скелетные и групповые частоты. Основные типы колебаний и соответствующие им области спектра.

Тема 2. ИК спектрометры.

Типы приборов: диспергирующие и недиспергирующие ИК спектрометры. Принципы устройства и действия ИК-спектрометров и ИК-Фурье спектрометров. Методы подготовки проб (жидкие, твердые и газообразные вещества). Способы регистрации спектров. Основы техники эксперимента: спектры пропускания, нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) и диффузного отражения.

Тема 3. ИК спектры: качественный и количественный анализ

Расшифровка и интерпретация ИК-спектров. Основные характеристики спектра (частота, интенсивность, форма полосы, ширина). Способы изображения ИК спектров. Анализ ИК-спектров. Расшифровка и интерпретация ИК-спектров. Количественный анализ. Закон Ламберта-Бугера-Бера.

Тема 4. Некоторые области применения ИК спектроскопии

Исследование реакционной способности поверхности твердых веществ методом ИК спектроскопии. Исследование кристаллической структуры неорганических соединений методом ИК-спектроскопии. ИК-спектроскопия in-situ.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения тестов по лекционному материалу, выполнения индивидуального задания, выполнения лабораторного практикума и написания отчетов, фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

В ходе выполнения лабораторного практикума и при проведении текущего контроля проверяются знания, получаемые по ОПК1 (РООПК 1.1, РООПК 1.2, РООПК 1.3), ОПК-2 (РООПК 2.3) и ПК-1 (РОПК 1.1, РОПК 1.2).

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен во втором семестре проводится в устной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух вопросов, проверяющих знания, полученные по ОПК-1 (РООПК 1.3) и ОПК-2 (РООПК 2.2). Продолжительность экзамена 1 час. Продолжительность подготовки ответа по билету составляет 40 минут, ответ – 20 минут.

Примеры экзаменационных билетов

Билет №1.

Вопрос 1. Основы метода ИК спектроскопии. Вращательные и колебательные спектры. Скелетные и групповые частоты.

Вопрос 2. Особенности метода подготовки проб жидких и твердых вещества для ИК спектроскопии.

Билет №2

Вопрос 1. Основные положения о симметрии нормальных колебаний и правила отбора колебаний в ИК спектроскопии;

Вопрос 2. Типы приборов: диспергирующие и недиспергирующие ИК спектрометры. Принципы устройства и действия ИК-Фурье спектрометров

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». К экзамену допускаются студенты, выполнившие лабораторный практикум в полном объеме и не имеющие задолженности по работам, предусмотренным текущим контролем в курсе.

Критерии оценивания ответов:

- «отлично» – студент демонстрирует глубокое знание теоретического материала, умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на вопросы, приводить примеры;

- «хорошо» – студент демонстрирует знание теоретического материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя;

- «удовлетворительно» – демонстрирует неполное, фрагментарное знание теоретического материала, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов;

- «неудовлетворительно» – демонстрирует существенные пробелы в знании теоретического материала, не способен его изложить и ответить на наводящие вопросы преподавателя, не может привести примеры, не способен правильно выполнить задание.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle»: <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=21490>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План лекционных и лабораторных занятий по дисциплине.

г) Методические указания по проведению лабораторных работ.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Ефимова А.И., Зайцев В.Б., Болдырев Н.Ю., Кашкаров П.К. Оптика: инфракрасная Фурье-спектроскопия: учебное пособие для вузов /- 2-е изд., испр. и доп. —

Москва: Издательство Юрайт, 2022. — 143 с. (Доступ: <https://urait.ru/bcode/492470> (дата обращения: 24.03.2022)).

– Бёккер Ю. Спектроскопия [Электронный ресурс]: учебник / Бёккер Ю.– Электрон. текстовые данные. – М.: Техносфера, 2009. – 528 с. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/12735.html>.

– Баличева Т.Г. и др. Физические методы исследования неорганических веществ: учеб. пособие – М.: Академия, 2006. 443 с. ISBN 5-7695-2261-5 (Доступ: библиотека ТГУ).

– Паукштис Е.А., Козик В.В., В.К. Иванов. Оптическая спектроскопия в исследовании химии поверхностных превращений. Томск: Издательский Дом Томского государственного университета, 2016. – 186 с. (Доступ: библиотека ТГУ).

– Пахомов Л.Г., Черноруков Н.Г., Сулейманов Е.В., Кирьянов К.В. Физические методы исследования неорганических веществ и материалов. Учебно-методический материал по программе повышения квалификации «Новые материалы электроники и оптоэлектроники для информационно-телекоммуникационных систем». Нижний Новгород, 2006, 84 с. (Доступ: <http://www.unn.ru/pages/e-library/aids/2006/28.pdf>).

– Драго Р. Физические методы в химии [Текст]: [в 2-х т]. М.: Мир, 1981. 456 с. 4. (Доступ: библиотека ТГУ)

– Казицина Л.А., Куплетская Н.В. Применение УФ-, ИК-, и ЯМР-спектроскопии в органической химии. – М.: Изд-во МГУ, 1979. (Доступ: библиотека ТГУ);

– Накамото К. ИК-спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений. – М.: Мир, 1991. – 535 с. (Доступ: библиотека ТГУ);

– Ситникова В.Е., Практикум по колебательной спектроскопии: Учебное пособие/ Т.Н. Носенко, В.Е. Ситникова, И.Е. Стрельникова, М.И. Фокина– СПб: Университет ИТМО, 2021. – 173 с. (Доступ: https://books.ifmo.ru/book/2483/praktikum_po_kolebatelnoy_spektroskopii_uchebnoe_posobie.htm)– ...

б) дополнительная литература:

– – Ефимова А.И., Зайцев В.Б., Болдырев Н. Ю., Кашкаров П. К. Оптика: основы инфракрасной фурье-спектрометрии: учебное пособие для среднего профессионального образования - 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2022. — 143 с. (Доступ: <https://urait.ru/bcode/495950> (дата обращения: 24.03.2022)).

– Григорьев А.И. Введение в колебательную спектроскопию неорганических соединений, Издательство МГУ, 1997. (Доступ: <https://knigogid.ru/books/536794-vvedenie-v-kolebatelnuyu-spektroskopiyyu-neorganicheskikh-soedineniy>)

– Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия. –М.: Мир, 1982, – 327 с. (Доступ: библиотека ТГУ);

– Литтл Л. Инфракрасные спектры адсорбированных молекул. М.: Мир, 1969. 514с. (Доступ: библиотека ТГУ);

– Беллами Л. Инфракрасные спектры сложных молекул, М 1963 (Доступ: библиотека ТГУ);

– Харланов А.Н., Шилина М.И. Инфракрасная спектроскопия для исследования адсорбционных, кислотных и основных свойств поверхности гетерогенных катализаторов – учебное пособие. М: - 2011 – 111 с. (Доступ: <https://www.kge.msu.ru/education/Kharlanov-Shilina.pdf>).

в) ресурсы сети Интернет:

– профессиональные поисковые системы, база данных NIST Chemical WebBook: <http://webbook.nist.gov/chemistry> ;

– профессиональные поисковые системы, база данных AIST: https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi .

- Wiley online library: <http://www.spectroscopynow.com>
- Spectroscopy: Solutions for materials analysis <https://www.spectroscopyonline.com>
- FTIR and Raman spectral libraries <http://www.ftirsearch.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 № 402, 6-го учебного корпуса ТГУ), оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций и компьютерной анимации, интерактивной доской.

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.

Лаборатории (аудитории № 102, 3 103, 6-го учебного корпуса ТГУ), оснащенные всем необходимым лабораторным оборудованием (сушильный шкаф, муфельная печь, вытяжные шкафы, ИК-спектрометром Agilent Technologies Cary 600 Series FTIR Spectrometer) и химической посудой.

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

Автор программы: Халипова Ольга Сергеевна, канд. техн. наук, кафедра неорганической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

Рецензент: Селюнина Лилия Александровна, канд. хим. наук, кафедра неорганической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент