

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:  
И.о. декана  
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

**Методы спектроскопического анализа**

**Модуль ИК спектроскопия**

по направлению подготовки

**04.03.01 Химия**

Направленность (профиль) подготовки:  
**Аналитическая химия (Analytical chemistry)**

Форма обучения  
**Очная**

Квалификация  
**Бакалавр**

Год приема  
**2022**

СОГЛАСОВАНО:  
Руководитель ОП  
Ю.Г. Слизов

Председатель УМК  
В.В. Шелковников

Томск – 2025

## **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.

ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием.

ОПК-6 Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе.

ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 1.1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

ИОПК 1.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.

ИОПК 2.4 Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

ИОПК 6.1 Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке.

ИОПК 6.2 Представляет информацию химического содержания с учетом требований библиографической культуры.

ИОПК 6.3 Представляет результаты работы в виде тезисов доклада на русском и английском языке в соответствии с нормами и правилами, принятыми в химическом сообществе.

ИОПК 6.4 Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и английском языках.

ИПК 1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР.

ИПК 1.2 Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР.

ИПК 1.4 Готовит объекты исследования.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

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

– сформировать способность проводить исследование образцов многокомпонентных систем методом ИК-спектроскопии с соблюдением норм техники безопасности, навыки пробоподготовки; съемки спектров и интерпретации полученных результатов;

– сформировать умение выбирать подход к анализу и оптимизировать условия анализа образцов в различном агрегатном состоянии методом ИК-спектроскопии для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.

### **3. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

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

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы.

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

Седьмой 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**

Английский

### **7. Объем дисциплины**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 з.е., 216 часов, из которых по модулю ИК спектроскопия:

- лекции: 12 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 (ИОПК 1.1, ИОПК 1.2), ОПК-2 (ИОПК-2.4), ОПК-6 (ИОПК 6.1, ИОПК 6.2, ИОПК 6.3, ИОПК 6.4) и ПК-1 (ИПК 1.1, ИПК 1.2, ИПК 1.4).

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

## **10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации**

Экзамен в седьмом семестре проводится по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей, проверяющих знания, полученные по ОПК-1 (ИОПК-1.1, ИОПК-1.2) и ПК-1 (ИПК-1.1). Первая часть представляет собой тест из 15 вопросов. Продолжительность тестирования 40 минут. Вторая часть – содержит один теоретический вопрос. Продолжительность подготовки ответа по билету с теоретическим вопросом составляет 20 минут, время ответ – 20 минут.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

## **11. Учебно-методическое обеспечение**

а) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (<https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>).

б) План лекций и практических занятий по дисциплине.

в) Методические указания по проведению практических работ.

## **12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет**

а) основная литература:

– Brian C. Smith Fundamentals of Fourier transform infrared spectroscopy - New York: CRC Press imprint of the Taylor & Francis Group, 2011. – 198 p.

– Barbara H. Stuart Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications - John Wiley & Sons – 223 p.

– Brian C. Smith, Infrared Spectral Interpretation: A Systematic Approach. CRC Press, Boca Raton, 1999.

– Brian C. Smith, Quantitative Spectroscopy: Theory and Practice. Academic Press, San Diego, 2002.

– P. Griffiths and J. DeHaseth, Fourier Transform Infrared Spectrometry, 2nd Ed. Wiley, New York, 2007.

– Jyrki Kauppinen and Jari Partanen, Fourier Transforms in Spectroscopy. Wiley, New York, 2001.

– Nakamoto Kazuo Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds. Part A: Theory and Applications in Inorganic Chemistry; Part B: Application in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry: Wiley – 424 p.

б) ресурсы сети Интернет:

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

– профессиональные поисковые системы, база данных AIST: [https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/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

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