

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
Спектроскопические методы анализа
по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
Химия

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2024

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК
В.В. Шелковников

Томск – 2024

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.

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 1.3 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

ИОПК 2.1 Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности.

ИПК 1.3 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР.

ИПК 1.4 Готовит объекты исследования.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить теоретические основы спектрального анализа, идентификации и количественного определения веществ.

– Научиться осуществлять выбор вариантов спектральных методов анализа для определения элементного состава веществ в реальных объектах.

– Владеть техникой проведения спектрального анализа, построения калибровочных характеристик, интерпретации спектрограмм для проведения качественного и количественного определения элементного состава анализируемых объектов.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

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

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Модуль Аналитическая химия.

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, органическая химия, физическая химия, высокомолекулярные соединения, математический анализ, физика, методы математической статистики в химии.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 з.е., 180 часов, из которых:

-лекции: 32 ч.

-лабораторные: 48 ч.

в том числе практическая подготовка: 48 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Спектроскопические методы анализа, их классификация.

Общая характеристика спектроскопических методов и этапы их развития. Классификация методов. Области применения. Электромагнитное излучение.

Тема 2. Метод атомной эмиссионной спектроскопии (АЭС). Общие положения.

Механизм возникновения спектров. Строение электронных оболочек атомов и их влияние на характер спектра. Зависимость интенсивности спектральных линий атомов и ионов от температуры, концентрации и положения атомов в ПС Д.И. Менделеева. Уравнение Больцмана. Способы оценки температуры плазмы, концентрации электронов, степени ионизации, времени пребывания атомов в зоне разряда и коэффициента использования пара. Влияние ионизации атомов на интенсивность спектральных линий атомов. Основы количественного атомно-эмиссионного спектрального анализа. Метод трех эталонов. Метод постоянного графика. Метод добавок. Типы спектральных приборов. Способы регистрации спектра. Освоение программы «Атом». Идентификация контрольных проб неизвестного состава.

Тема 3. Оптимизация условий проведения атомно-эмиссионного спектрального анализа.

Влияние химических процессов, протекающих в электродах и в зоне разряда, на интенсивность спектральных линий. Основные принципы химико-спектрального анализа. Ряды летучести металлов и их соединений. Влияние скорости парообразования на интенсивность атомных линий в спектре (роль химических процессов, протекающих в электрических разрядах и электродах). Направленные химические реакции, используемые для увеличения скорости, испарения компонентов пробы. Термодинамическое моделирование (ТДМ) высокотемпературных процессов, протекающих в электродах и электрических разрядах. Программы ТДМ «Астра», «Терра». Особенности разделения и концентрирования, при подготовке концентрата-коллектора к спектральному анализу. Особенности анализа веществ особой чистоты и объектов сложного состава. Приготовление стандартных образцов - съемка спектров. Построение гистограмм для выбора времени экспозиции и оптимизации условий проведения спектрального анализа. Построение калибровочных графиков с помощью программа «Атом с использованием стандартных образцов состава графитового коллектора микропримесей (комплект СОГ-37) ГСО 8487-2003.

Тема 4. Дуговая атомно-эмиссионная спектроскопия с многоканальным анализатором эмиссионных спектров.

Источники возбуждения спектров «Везувий» и «Шаровая молния», используемые в спектральном комплексе «Гранд» с МАЭС. Принцип работы фотодиодной линейки на кремниевых кристаллах. Полихроматор «Роуланд». Программный комплекс «Атом». Проведение качественного спектрального анализа. Построение градуировочных графиков. Проведение количественного спектрального анализа. Оптимизация условий проведения спектрального анализа с помощью программного комплекса «Атом». Пробоподготовка контрольных образцов для проведения спектрального анализа включающая процедуры:

озоления, разбавления и гомогенизацию проб с последующим введением стабилизирующего носителя. Заточка и набивка электродов. Выбор условий анализа и подготовка к съемке спектров. Съёмка спектров контрольных образцов. Статистическая обработка результатов. Обработка полученных данных контрольных образцов с помощью программы «Атом». Обобщение результатов построение корреляционных зависимостей по полученным массивам данных для всей группы.

Тема 5. Эмиссионная фотометрия пламени. Атомно-абсорбционный метод анализа.

Основные теоретические положения, источники возбуждения и приборы для метода пламенной фотометрии. Интенсивность спектральных линий и влияние на интенсивность температуры пламени, степени ионизации атомов, диссоциации молекул. Процессы, протекающие в плазменной зоне. Методы количественного анализа. Теоретические основы атомно-абсорбционного метода. Условия образования поглощающего слоя, поглощение световой энергии атомами, формирование аналитического сигнала. Связь оптической плотности с концентрацией элемента в пламени. Помехи, влияние состава раствора на результаты измерения. Основные узлы атомно-абсорбционной установки. Приготовление стандартных растворов. Прямой анализ контрольных образцов водных объектов методом фотометрии пламени на содержание натрия и калия и методом атомно абсорбционной спектроскопии на содержание меди и цинка. Статистическая обработка результатов анализа.

Тема 6. Методы масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой. Оптико-эмиссионная спектроскопия с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-ОЭС). Теоретические основы методов.

Индуктивно-связанная плазма. Микроволновая плазма. Процессы ионизации и принципиальные схемы приборов. Применение масс-спектрометрии и оптико-эмиссионной спектроскопии для проведения мультиэлементного анализа.

Тема 7. Молекулярная абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях.

Общая характеристика метода, его возможности. Основные законы поглощения электромагнитного излучения. Причины отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бера. Физико-химические условия образования фотометрируемых форм. Влияние различных факторов. Типы соединений, применяемых в спектрофотометрии. Аппаратура и техника измерения величин, характеризующих звукопоглощение. Методы количественного анализа. Применение метода в анализе природных и промышленных объектов. Выбор оптимальных условий определения. Особенности фотометрического определения органических соединений. Применение метода для изучения равновесий в растворах: определение состава и прочности комплексных соединений, заряда комплексного иона, константы диссоциации органического реагента. Определение содержания Fe(III) в питьевой и сточной воде; Сравнение чувствительности определения содержания Fe(III) в питьевой и сточной воде с различными реагентами; Определение подвижных соединений фосфора в почвах; Определение константы диссоциации органического реагента. Метод спектрофотометрического титрования и его использование. Использование СФМ при анализе многокомпонентных систем; Дифференциальный СФМ. Экстракционно-спектрофотометрический метод и его использование; Определение фосфора, кремния и мышьяка в виде гетерополисоединений методом СФМ. Метод твердофазной спектрофотометрии. Определение органических загрязнителей в водных средах методом СФМ.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, выполнения теоретических и расчётных домашних заданий, сдачи отчетов по лабораторным работам и фиксируется в форме контрольной точки в семестре.

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 проводится в устной форме обсуждения заданий экзаменационного билета. Экзаменационный билет включает четыре задания. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

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) Электронный учебный курс по дисциплине в электронной образовательной среде iDO - <https://lms.tsu.ru/enrol/index.php?id=30526>

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

в) Методические указания по проведению лабораторных работ.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– В.И. Васильева Спектральные методы анализа: практическое руководство / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина, С.И. Карпов. – СПб. –Лань, 2021. – 416 с.

– В.И. Струнин Атомная спектроскопия / В.И. Струнин, Н.Н. Струнина, Б.Т. Байсова. – Омск: РИО ОГУ 2013.–104 с.

– Марченко, З. Методы спектрофотометрии в УФ и видимой областях в неорганическом анализе. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014.–711 с.

б) дополнительная литература:

– Пупышев А. А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ. – М.: Техносфера, 2009.– 782 с.

– Другов Ю. С. Экспресс-анализ экологических проб / Ю. С. Другов, А. Г. Муравьев, А. А. Родин. – М.: БИНОМ, 2010, 424 с.

– Жуков А. Ф. Аналитическая химия. Физические и физико-химические методы анализа (электронный ресурс) – М. : МГУ, 2017. 250 с. <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000385853/000385853.djvu>

– Другов Ю. С. Анализ загрязненной почвы и опасных отходов : практическое руководство / Другов Ю. С., Родин А. А.. – М.: Лаборатория знаний, 2020. – 472 с.. URL: <https://e.lanbook.com/book/135483>. URL: <https://e.lanbook.com/img/cover/book/135483.jpg>

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.

Все лаборатории оснащены вытяжными шкафами, стеклянной и фарфоровой лабораторной посудой, измерительным инструментом (весы, термометры, рН-метры, УФ-спектрофотометр и т.д.). Кроме того, в лабораториях имеется нагревательное оборудование (электроплитки и термостатирующие шкафы), и другое оборудование.

Учебный процесс по дисциплине «Спектроскопические методы анализа» поддерживается самым современным оборудованием:

- атомно-эмиссионный спектрометр "Гранд" с многоканальным анализатором эмиссионных спектров в комплексе с полихроматором «Роуланда» и генератором «Везувий», Россия, НПО «Оптоэлектроника»
- дифракционный атомно-эмиссионный спектрометр ДФС-452, совмещенный с МАЭС;
- спектрофотометры «Evolution 600» USA, «Specol»; СФ-56
- атомно-абсорбционный спектрометр SOLAAR S2 Thermo Electron Corporation;
- аналитические весы АДВ-200;

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

15. Информация о разработчиках

Отмахов Владимир Ильич, докт. хим. наук, профессор, кафедра аналитической химии химического факультета ТГУ, профессор.

Саранчина Надежда Васильевна, канд. хим. наук, кафедра аналитической химии химического факультета ТГУ, доцент.