

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

Спектральные методы диагностики материалов

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
А.С. Князев

Председатель УМК
Л.Н. Мишенина

Томск – 2023

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 приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.

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 1.2 Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ИОПК 1.3 Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ИПК 1.1 Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий

ИПК 1.3 Использует 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. Проводит поиск, анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике исследовательской работы

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить понятийный аппарат и основные принципы современных методов исследования состава и структуры функциональных материалов, связанных с исследованием их спектров;

– Изучить возможности и ограничения спектральных методов, особенности пробоподготовки объектов к исследованиям;

– Приобрести навыки работы с научной литературой, обработкой и представлением экспериментальных данных;

– Научиться разрабатывать детальный и комплексный план исследований состава и структуры функциональных материалов;

– Приобрести практические навыки работы на спектрометрах и расшифровки спектров.

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.

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

Второй семестр, зачет с оценкой

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ по следующим дисциплинам: «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Строение вещества».

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

-лекции: 12 ч.

-практические занятия: 20 ч.

в том числе практическая подготовка: 20 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.

Тема 2. 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 3. Теоретические основы колебательной спектроскопии. Основные типы колебаний и соответствующие им области спектра. Работа с базами данных.

Тема 4. Техника эксперимента в ИК-спектроскопии. Спектроскопия диффузного отражения и нарушенного полного внутреннего отражения в ИК-области. Анализ ИК-спектров. Устройство ИК-спектрометра, ИК-Фурье спектрометр.

Тема 5. Основы эффекта комбинационного рассеяния. Анализ КР-спектров. Устройство спектрометра КР. Применение метода КР.

Тема 6. *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.

Тема 7. Спектроскопия видимой и ультрафиолетовой области. Поглощающие свойства молекул. Основные электронные переходы. Плазмонное поглощение.

Тема 8. Люминесцентный анализ (ЛА). Определение понятия люминесценции, основные закономерности люминесценции растворов. Люминесценция веществ и их химическая структура. Систематизация методов ЛА. Устройство прибора.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения тестов по лекционному материалу, степени участия в практических занятиях, выполнения домашних заданий по теме дисциплины и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Изучение дисциплины завершается дифференцированным зачетом, допуском к которому является успешное выполнение заданий текущего контроля.

Зачет проводится в виде устной защиты индивидуального задания, оформленного в виде презентации и пояснительной записки. На защите доклада оценивается полнота раскрытия темы, использование понятийного аппарата, умение вести научную дискуссию и отвечать на вопросы аудитории.

Примерный перечень тем индивидуальных заданий:

1. Исследование объектов магистерской диссертации студента методом ИК-спектроскопии. Интерпретация результатов.
2. Исследование объектов магистерской диссертации студента методом КР-спектроскопии. Интерпретация результатов.
3. Исследование объектов магистерской диссертации студента методом УФ-Вид спектроскопии. Интерпретация результатов.
4. Определение состава продуктов отжига органических объектов.
5. Определение состава полимерной смеси.
6. Исследования процесса сорбции щавелевой кислоты на ZnO *in situ*.

Результаты зачета определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

«Отлично» – представленный доклад выполнен в соответствии с поставленными целями и задачами. Студент четко изложил материал с обоснованием полученных результатов. Ответы на вопросы даны в полном объеме и аргументированы. Студент показал отличную подготовку и эрудицию по пройденным темам, грамотно использует научную лексику.

«Хорошо» – представленный доклад выполнен в соответствии с поставленными целями и задачами. Имеют место несущественные отклонения от требований. Представление научного доклада проведено грамотно, имеют место неточности в изложении. Ответы на отдельные вопросы даны не в полном объеме. Грамотно использует научную лексику. Студент показал хорошую подготовку и эрудицию по пройденным темам.

«Удовлетворительно» – представленный доклад в целом соответствуют поставленным целями и задачами. Имеют место недочеты в изложении материала. На некоторые вопросы не даны ответы. Научная лексика используется ограниченно.

11. Учебно-методическое обеспечение

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

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

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

- б) дополнительная литература
- В. Stuart Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications. New York John Wiley & Sons, 2004. – 228 p.
 - L. Richard Raman spectroscopy for chemical analysis/ Richard L. McCreery, New York John Wiley & Sons . 2000. – 420 p.
 - В.В. Лебедева Инструментальная оптика/ Лебедева В.В. – М. Физ. фак-т МГУ им. М. В. Ломоносова, 2005. – 282 с.
 - Н. Харрик Спектроскопия внутреннего отражения/ Харрик Н. - М.: Мир,1970.
5. Золотарев В.М. Разработка методов и техники спектроскопии НПВО// Оптический 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) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:
- 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/>

- в) профессиональные базы данных:
- <https://webbook.nist.gov/chemistry/> – справочная база данных NIST;
 - https://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi – спектральная база данных органических соединений

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.

Лаборатории, оснащенные следующим оборудованием:

- ИК-спектрометр Nicolet 6700 (ThermoScientific, USA) с базой данных Omnia Spectra
- КР-спектрометр Nicolet NXR 9650 (ThermoScientific, USA)
- УФ-Вид спектрометр Evolution 600 (ThermoScientific, USA);

15. Информация о разработчиках

Изаак Татьяна Ивановна, канд. хим. наук, доцент, кафедра аналитической химии, доцент.