

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины  
Спектральные методы**

Направление подготовки  
**04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Квалификация  
**Специалист**

Форма обучения  
**Очная**

**1. Код и наименование дисциплины: Б1.В.ДВ.1.8.4 «Спектральные методы»**

**2. Цель изучения дисциплины** – приобретение теоретических знаний и навыков в области спектрального анализа различных объектов, умение на основе поставленных задач правильно оценивать и выбирать методы аналитического контроля, включающие оценку диапазонов определений, пределов обнаружений, показателей качества измерений, способов пробоподготовки, позволяющих получать результаты с требуемой точностью.

**3. Год/годы и семестр/семестры обучения:** 4 год, 8 семестр

**4. Общая трудоемкость дисциплины (модуля)** составляет 4 зачетных единицы, 144 часа, из которых 72 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (24 часа – занятия лекционного типа, 48 часов – лабораторные работы), 36 часов – самостоятельная работа обучающегося, включая выполнения индивидуальных заданий, консультации и т.д., 36 часов отводится на промежуточную аттестацию (подготовка обучающегося к экзамену).

**5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы** (заполняется в соответствии с картами компетенций)

<b>Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)</b>	<b>Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)</b>
<b>Второй уровень</b> (углубленный) <b>(ОПК-2) – II</b> владение навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	<b>В (ОПК-2) –II –Владеть:</b> способностью проводить физико-химические исследования или анализ спектроскопическими методами, осуществлять обработку полученных данных, в том числе с помощью компьютерных программ
<b>Первый уровень</b> (пороговый) <b>(СК-2) – I</b> владение основами методов пробоотбора и пробоподготовки, идентификации и определения, математической статистики для обработки аналитической информации и умением их применять в анализе реальных объектов	<b>З (СК-2) –I – Знать:</b> теоретические основы спектроскопических методов идентификации и количественного определения элементов  <b>У (СК-2) – I – Уметь:</b> осуществлять выбор варианта спектроскопического определения элементов и веществ в реальных объектах

## 6. Содержание дисциплины (модуля) и структура учебных видов деятельности

### 6.1. Структура учебных видов деятельности дисциплины «Спектральные методы»

Раздел дисциплины	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)	Промежуточный контроль (час.)
		Лекции	Практические занятия		
Общая характеристика спектроскопических методов и этапы их развития.	4	2		2	
Дуговая атомная эмиссионная спектроскопия. Источники возбуждения спектров. Типы спектральных приборов. Способы регистрации спектра.	6	2		4	
Влияние химических процессов, протекающих в электродах и в зоне разряда на интенсивность спектральных линий. Основные принципы химико-спектрального анализа.	6	2		4	
Атомно-эмиссионная спектроскопия с многоканальным анализатором эмиссионных спектров. Метрология спектрального анализа. Разработка методик спектрального анализа.	30	2	20	8	
Эмиссионная фотометрия пламени. Атомно-абсорбционные методы анализа.	18	4	8	6	
Атомно-флуоресцентный спектральный анализ. Рентгенофлуоресцентный анализ	8	2	2	4	
Атомно-эмиссионная спектроскопия с индукционно-связанной плазмой.	6	2	2	2	
Масс-спектрометрия с индукционно-связанной плазмой.	8	2	4	2	
Молекулярная абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой областях	22	6	12	4	
Промежуточный контроль	36				36
<b>ВСЕГО</b>	<b>144</b>	<b>24</b>	<b>48</b>	<b>36</b>	<b>36</b>

## 6.2. Программа дисциплины

**Тема 1.** Общая характеристика спектроскопических методов и этапы их развития. История развития методов атомной спектроскопии. Классификация методов. Области применения. Электромагнитное излучение.

**Тема 2. Атомная эмиссионная спектроскопия.** Строение электронных оболочек атомов и их влияние на характер спектра. Механизм возникновения спектров. Краткие сведения об оптических спектрах атомов, ионов и молекул. Природа молекулярных полос и сплошного спектра. Ширина и форма спектральных линий. Интенсивность атомных спектральных линий. Зависимость интенсивности атомных спектральных линий от температуры (самопоглощение, самообращение). Зависимость интенсивности спектральных линий от концентрации и энергии возбуждения. Связь между строением спектра и положением элемента в периодической системе 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. Основы количественного атомно-эмиссионного спектрального анализа. Метод трех эталонов. Метод постоянного графика. Метод добавок.

**Тема 3. Источники возбуждения спектров.** Механизм возникновения и поддержания электрических разрядов, характеристика источников возбуждения (дуговой разряд: дуга постоянного тока, дуга переменного тока, плазмотрон; искровой разряд: конденсированная и управляемая искра). Способы стабилизации дугового и искрового разрядов. Полый катод, лазер – схемы и принцип действия. Индукционно-связанная плазма.

**Тема 4 Типы спектральных приборов. Способы регистрации спектра.** Приборы, используемые для регистрации эмиссионного спектра (кварцевые и с дифракционной решеткой). Основные характеристики спектральных приборов (дисперсия, разрешающая способность, светосила). Способы освещения щели. Визуальное наблюдение спектра. Фотографические методы. Фотоэлектрические. Характеристическая кривая. Фотоэлектрические приемники: типы приемников, основные свойства фотоэлементов. Фотоумножители.

**Тема 5. 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. Программа ТДМ «Астра». Особенности разделения и концентрирования, подготовки концентрата-коллектора к спектральному анализу. Особенности анализа веществ особой чистоты и объектов сложного состава.

**Тема 6. Атомно-эмиссионная спектроскопия с многоканальным анализатором эмиссионных спектров (МАЭС).** 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».

**Тема 7. 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. Источники излучения, атомизация, спектральные приборы. Методы количественного анализа. Чувствительность атомно-абсорбционного метода.

**Тема 8. Атомно-флуоресцентный спектральный анализ. Рентгенофлуоресцентный анализ.** Основные закономерности флуоресценции. Источники атомизации и возбуждения. Спектр атомной флуоресценции. Лазерный атомно-флуоресцентный спектральный анализ. Зависимость интенсивности флуоресценции от интенсивности возбуждающего источника света. Неселективные помехи. Аппаратура для проведения анализа.

**Тема 9. Атомно-эмиссионная спектроскопия с индукционно-связанной плазмой. Масс-спектрометрия с индукционно-связанной плазмой.** Высокочастотный плазмотрон. Индукционно-связанная плазма (ИСП). Основные температурные зоны ИСП. Теоретические основы метода масс-спектрометрии с индукционно-связанной плазмой. Теоретические основы метода атомно-эмиссионной спектроскопии с индукционно-связанной плазмой. Аппаратура для проведения анализов.

**Тема 10. Метрология спектроскопии.** Источники погрешности в спектральных методах анализа. Метрологическая аттестация методик. Чувствительность методов. Пределы обнаружения. Внутрिलाбораторный контроль за достоверностью результатов, получаемых методами атомной спектроскопии.

**Тема 11. Молекулярная абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой области.** 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 светопоглощение. 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

### **6.3. Форма промежуточной аттестации: экзамен.**

## **7. Ресурсное обеспечение дисциплины «Спектральные методы»**

### **7.1. Основная литература**

1. Пупышев А.А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ / А.А. Пупышев. -М.: Техносфера, 2009. – 784 с.
2. Струнин В.И. Атомная спектроскопия / В.И. Струнин, Н.Н. Струнина, Б.Т. Байсова. – Омск: РИО ОГУ, 2013. – 104 с.
3. Беккер Ю. Спектроскопия / Ю. Беккер. – М.: Техносфера, 2009. – 528 с.
4. Змитревич А.Г. Атомно-эмиссионный спектральный анализ ферросплавов / А.Г. Змитревич, А.А. Пупышев. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2009. – 270 с.
5. Большова Т.А. Основы аналитической химии: учебник для студентов вузов. Т. 1. / Т.А. Большова, Г.Д. Брыкина, А.В. Гармаш и др.; под ред. Ю. А. Золотова. М.: Академия, 2012. – 383 с.

6. Карпов Ю. А. Методы пробоотбора и пробоподготовки / Ю. А. Карпов, А.П. Савостин. – М.: БИНОМ Лаборатория знаний, 2012. – 243 с.

#### **7.2. Дополнительная литература**

1. Пентин Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии: уч. пособие / Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина. – М.: Мир: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2008. – 398 с.
2. Илларионова Е.А. Фотометрия. Теоретические основы метода. Практическое применение метода: уч. пособие / Е.А. Илларионова, И.П. Сыроватский. – Иркутск, 2013.
3. Мовчан И.Н. Аналитическая химия: физико-химические и физические методы анализа: уч. пособие / И.Н. Мовчан [и др.]. – Казань: Изд-во КНИТУ, 2013. – 236 с.
4. Пупышев А.А. Масс-спектрометрия с индукционно-связанной плазмой. Образование ионов / А.А. Пупышев, В.Т. Суриков. – Екатеринбург: УрО РАН, 2006. – 276 с.

#### **7.3. Электронные ресурсы**

1. Программа для термодинамического моделирования высокотемпературных процессов «АСТРА».
2. Программа для расчета параметров плазмы и моделирования физико-химических процессов в источниках возбуждения «Плазма».
3. Программный комплекс «Атом».
4. Программный комплекс ««SOLAAR S2»»
5. Пупышев А.А. Термодинамическое моделирование термодинамических процессов в спектральных источниках. Учебное электронное текстовое издание. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2007. [Электронный ресурс](#).
6. Пупышев А.А. Пламенный и электротермический атомно-абсорбционный анализ с использованием спектрометра AAnalyst 800. Учебное электронное текстовое издание. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2008. [Электронный ресурс](#).
7. Шелковников В.В., Баталова В.Н., Киселева М.А., Отмахов В.И., Скворцова Л.Н., Зарубин А.Г. Физико-химические методы анализа. Учебно-методический комплекс (УМК). Томск, 2011. <http://edu.tsu.ru/eor/resource/557/tpl/index.html>
8. Жуков А.Ф. Аналитическая химия. Физические и физико-химические методы анализа (электронный ресурс) / А.Ф. Жуков [и др.]; под ред. О.М. Петрухина <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000385853/000385853.djvu>

#### **7.4. Учебно-методические пособия кафедры**

1. Отмахов В.И., Петрова Е.В. Метод дуговой атомной спектроскопии с многоканальным анализатором эмиссионных спектров (Учебно-методическое пособие). Томск: РИО ТГУ, 2014. – 75 с.
2. Отмахов В.И., Петрова Е.В., Киселева М.А. Спектроскопические методы анализа. Учебное пособие. Томск: РИО ТГУ, 2010. – 149 с.
3. Отмахов В.И., Петрова Е.В., Отмахова З.И. Пламенно-фотометрический и атомно-абсорбционный методы анализа: Учебно-методическое пособие. - Томск: Изд-во ТГУ, 1998. – 63 с.
4. Петрова Е.В., Отмахова З.И., Отмахов В.И. Атомно-эмиссионный анализ: Учебно-методическое пособие. - Томск: Изд-во ТГУ, 1997. – 59 с.

**8. Преподаватели (авторы):** д.т.н., профессор В.И. Отмахов, к.х.н., доцент Л.Б. Наумова.