

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины  
Спектральные методы**

Направление подготовки  
**04.03.01 Химия**

Квалификация  
**Бакалавр**

Форма обучения  
**Очная**

Томск 2015

**1. Код и наименование дисциплины: Б1.В.ДВ.4.8.4 «Спектральные методы»**

**2. Цель 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 3 зачетных единицы, 108 часов, из которых 56 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (24 часа – занятия лекционного типа, 32 часа – лабораторные работы), 16 часов – самостоятельная работа обучающегося, включая выполнения индивидуальных заданий, консультации и т.д.), 36 часов – подготовка 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>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 умение 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
<b>Второй уровень</b> (углубленный) <b>(ОПК-2) – II</b> владение навыками проведения химического эксперимента, основными 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

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

### 6.1. Структура и содержание 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.	4	2		2	
Влияние химических процессов, пропекающих в электродах и в зоне разряда, на интенсивность спектральных линий. Основные принципы химико-спектрального анализа.	6	4		2	
Атомно-эмиссионная спектроскопия с многоканальным анализатором эмиссионных спектров. Метрология спектрального анализа. Разработка методик спектрального анализа.	22	4	16	2	
Эмиссионная фотометрия пламени. Атомно-абсорбционные методы анализа.	8	2	4	2	
Масс-спектрометрия с индукционно-связанной плазмой.	8	2	4	2	
Молекулярная абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой областях	20	8	8	4	
Промежуточный контроль	36				36
<b>ВСЕГО</b>	<b>108</b>	<b>24</b>	<b>32</b>	<b>16</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.** 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 9.** Метрология спектроскопии. Источники погрешности в спектральных методах анализа. Метрологическая аттестация методик. Чувствительность методов. Пределы обнаружения. Внутрилабораторный контроль за достоверностью результатов, получаемых методами атомной спектроскопии.

**Тема 10.** 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.

### **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/resourse/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 спектрометрии 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.
1. 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.
2. 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.