

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины**  
**Физические методы исследования**

Направление подготовки  
**04.03.01 Химия**

Квалификация  
**Бакалавр**

Форма обучения  
**Очная**

Томск – 2015

**1. Код и наименование дисциплины – Б1.В.ОД.4 – «Физические методы исследования»**

**2. Цель курса:** освоение теоретических основ изучаемых физических методов исследования, приобретение навыков их практического применения и владение на основе поставленных задач способностью оптимального выбора методов исследования.

**3. Год/годы и семестр/семестры обучения:** 3 год, 5 семестр.

**4. Общая трудоемкость дисциплины** составляет 3 зачетных единицы, 108 часов, из которых 70 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 52 часа – лабораторные работы), 38 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

**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>(ОПК-1) –I</b> способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	<b>З (ОПК-1) –I – Знать:</b> теоретические основы «Физических методов исследования»
<b>Первый уровень</b> (пороговый) <b>(ОПК-2) –I</b> владение навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	<b>В (ОПК-2) –I – Владеть:</b> базовыми навыками оптимального выбора вариантов физических методов исследования для решения практических задач; навыками проведения химического эксперимента с соответствующим оформлением результатов.

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

### 6.1. Структура дисциплины «Физические методы исследования»

Раздел дисциплины	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Практические занятия	
Общая характеристика спектроскопических методов и этапы их развития.	4	2		2
Атомная эмиссионная спектроскопия. Источники возбуждения спектров. Типы спектральных приборов. Способы регистрации спектра.	8	4		4
Атомно-эмиссионная спектроскопия с визуальной, фотографической и фотоэлектрической регистрацией спектров.	28	2	16	10
Эмиссионная фотометрия пламени. Атомно-абсорбционные методы анализа.	14	2	8	4
Молекулярная абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях.	14	2	4	8
Использование рентгеновского излучения для анализа состава и структуры веществ.	14	2	8	4
Рентгенофлуоресцентный анализ	14	2	8	4
Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Методы масс-спектрометрии.	12	2	8	2
<b>ВСЕГО</b>	<b>108</b>	<b>18</b>	<b>52</b>	<b>38</b>

## 6.2. Программа дисциплины

### Модуль 1. Спектроскопические методы анализа, их классификация. Метод атомной эмиссионной спектроскопии (АЭС)

- 1. Общая характеристика спектроскопических методов** и этапы их развития. История развития методов атомной спектроскопии. Классификация методов. Области применения. Электромагнитное излучение.
- 2. Теоретические основы метода АЭС.** Строение электронных оболочек атомов и их влияние на характер спектра. Механизм возникновения спектров. Связь между строением спектра и положением элемента в периодической системе Д.И. Менделеева. Краткие сведения об оптических спектрах атомов, ионов и молекул. Природа молекулярных полос и сплошного спектра. Ширина и форма спектральных линий.
- 3. Основы количественного атомно-эмиссионного спектрального анализа.** Интенсивность атомных спектральных линий. Зависимость интенсивности атомных спектральных линий от температуры (самопоглощение, самообращение). Зависимость интенсивности спектральных линий от концентрации и энергии возбуждения. 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. Методы количественного анализа: метод градуировочного графика, метод добавок.
- 4. 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. Полюс катод, лазер – схемы и принцип действия. Пламя, индукционно-связанная плазма.
- 5. 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 приёмники: типы приёмников, основные свойства фотоэлементов. Фотоумножители.
- 6. Эмиссионная фотометрия пламени и Атомно-эмиссионная спектроскопия с многоканальным анализатором эмиссионных спектров (МАЭС).** Особенности метода ФП, решаемые задачи. 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 калибровочных графиков. Проведение количественного спектрального анализа. Оптимизация условий проведения спектрального анализа с помощью программного комплекса «Атом».

### Модуль 2. Методы атомной и молекулярной абсорбционной спектрометрии

- 1. Метод атомно-абсорбционной спектрометрии.** Основные теоретические положения, источники возбуждения. Метод ААС с пламенным источником атомизации. 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.

2. **Молекулярная абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях.** Общая характеристика, возможности метода. Законы поглощения электромагнитного излучения. Причины отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бера. Физико-химические условия образования фотометрируемых аналитических форм. Типы соединений, используемых в спектрофотометрии. Выбор оптимальных условий определения. Устранение влияния сопутствующих компонентов. Аппаратура и методы измерения величин, характеризующих светопоглощение. Практическое применение метода для решения аналитических и физико-химических задач.

### **Модуль 3. Использование рентгеновского излучения для анализа состава и структуры веществ**

1. **Теоретические основы метода.** Виды излучения и его характеристики. Основные виды переходов в молекулах. Классификация методов исследования на основе видов первичного и вторичного пучка, энергий зондирующих частиц и по характеру взаимодействий зондирующих пучков и полей с веществом. Генерация рентгеновского излучения. Устройство рентгеновской трубки, фильтрация рентгеновского излучения. Процессы взаимодействия рентгеновского излучения с веществом. Закон Мозли. Фотоэффект, сечение фотоэффекта. Длина свободного пробега электронов. Безызлучательный переход, флуоресцентный выход. Упругое (рэлеевское) рассеяние. Эффект Комптона. Методы рентгеновского анализа.
2. **Рентгенофлуоресцентный анализ (РФЛА).** Рентгеновская флуоресценция, обозначение рентгеновских линий. Аппаратура, используемая в РФЛА. Энергодисперсионные и волновые (последовательные и многоканальные) спектрометры. Детекторы рентгеновского излучения. Способы рентгенофлуоресцентного анализа. Качественный анализ, сигнатурный анализ. Количественный анализ, способы учета матричного эффекта, внутренний и внешний стандарт. Области использования и преимущества РФЛА.
3. **Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС).** Основное уравнение фотоэффекта. Вид фотоэлектронного спектра, обозначение линий. Возможности метода РФЭС, глубина анализа. Химический сдвиг, идентификация функциональных групп и электронных состояний. Оже-эффект, Оже-электронная спектроскопия. Устройство спектрометра, подготовка образцов для исследования. Интерпретация спектров.

### **Модуль 4. Методы масс-спектрометрии.**

Процессы ионизации и принципиальные схемы масс-спектрометров. Ионизация атомов и молекул. Процесс ионизации и типы ионов. Методы ионизации. Принципиальные схемы масс-спектрометров. Магнитный масс-спектрометр. Динамические масс-спектрометры. Спектрометр ион-циклотронного резонанса. Применение масс-спектрометрии. Идентификация и установление строения веществ. Определение потенциалов ионизации молекул и появления. Масс-спектральные термодинамические исследования.

#### **6.3. Форма промежуточной аттестации –зачет**

### **7. Ресурсное обеспечение дисциплины «Физические методы исследования»**

#### **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.

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

1. Илларионова Е.А. Фотометрия. Теоретические основы метода. Практическое применение метода: уч. пособие / Е.А. Илларионов, И.П. Сыроватский. – Иркутск, 2013.
2. 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.
3. Юинг Г. Инструментальные методы химического анализа / Г. Юинг; пер. с англ. – М.: Мир, 1989. – 608 с.
4. Пентин Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии: уч. пособие / Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина. – М.: Мир: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2008. – 398 с.
5. 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. Программный комплекс «Атом».
2. Программный комплекс «SOLAAR S2»
3. Пупышев А.А. Термодинамическое моделирование термохимических процессов в спектральных источниках. Учебное электронное текстовое издание. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2007. [Электронный ресурс](#).
4. 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](#).
5. 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>
6. 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.
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:** д.т.н., профессор В.И. Отмахов, к.х.н., доцент Е.В. Петрова, к.х.н., доцент Т.И. Изаак

**Авторы:** д.т.н., профессор В.И. Отмахов, к.х.н., доцент Т.И. Изаак