

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета  
\_\_\_\_\_ А.С. Князев

« августа 2022 г.

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

**2022**

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.В.ДВ.05.01

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

\_\_\_\_\_ А.С. Князев

Председатель УМК

\_\_\_\_\_ В.В. Хасанов

Томск – 2022

## **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 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.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

– Освоить аппарат основных спектроскопических методов исследования и их физические основы.

– Научиться применять понятийный аппарат методов спектроскопии для самостоятельного выбора метода исследования, подготовки образцов, проведения измерений и интерпретации результатов для решения практических задач профессиональной деятельности.

## **3. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули) по выбору 5 (ДВ5)».

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 результаты обучения по следующим дисциплинам: Физика, Физическая химия и 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. 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 2. ИК- и КР-спектроскопия, теоретические основы и практические аспекты применения. Теоретические основы колебательной спектроскопии. Основные типы колебаний и соответствующие им области спектра. Основные элементы ИК-спектрометра, ИК-Фурье спектрометр. Техника эксперимента. Спектроскопия диффузного отражения и нарушенного полного внутреннего отражения в ИК-области. Анализ ИК-спектров.

Основы эффекта комбинационного рассеяния. Устройство спектрометра КР. Применение метода КР. Определение структуры молекулы по данным ИК-спектроскопии и спектроскопии КР.

Тема 3. Спектроскопия видимой и ультрафиолетовой области. Поглощающие свойства молекул. Основные электронные переходы. Комплексы с переносом заряда. Комплексы переходных металлов. Плазмонное поглощение. Природа света.

Оптика в спектроскопии. Физические световые единицы. Фотометрические световые единицы. Источники света. Геометрическая и волновая оптика. Монохроматоры. Фотодетекторы. Устройство спектрометра, техника УФ-спектроскопии. Исследование мутных и рассеивающих образцов. Сфера Ульбрихта. Спектроскопия диффузного отражения, преобразование Кубелки-Мунка.

Тема 4. Люминесцентный анализ (ЛА). Определение понятия люминесценции, основные закономерности люминесценции растворов. Люминесценция веществ и их химическая структура. Систематизация методов ЛА. Устройство прибора. Флуоресцентные индикаторы. Люминесцентный анализ в химии. Хемилюминесценция и ее использование в ЛА. Катодо- и рентгенолюминесценция.

Тема 5. *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.

## **9. Текущий контроль по дисциплине**

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения тестов по лекционному материалу, проведению практического исследования свойств материалов, используемых в магистерской диссертации с интерпретацией результатов и защитой отчета и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

## **10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации**

Зачет с оценкой во втором семестре проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит теоретический вопрос и две задачи. Продолжительность зачета 1,5 часа.

Примерный перечень теоретических вопросов

1. Вопрос 1. Устройство Фурье-спектрометра
2. Вопрос 2. Спектроскопия диффузного отражения
3. Вопрос 3. Физические основы комбинационного рассеяния света

Примеры задач:

1. Задача 1. Определение состава продуктов отжига органических объектов. Требуется: обосновать выбор спектроскопического метода исследования.
2. Задача 2. Определение состава полимерной смеси. Требуется: обосновать выбор метода исследования и способ интерпретации результатов.
3. Задача 3. Исследования процесса сорбции щавелевой кислоты на ZnO *in situ*. Требуется: описать метод исследования и методику измерений.

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

Оценка «отлично» выставляется в случае посещения не менее 90% лекционных и 100% практических занятий, выполнения всех заданий, выполнения практических исследований и защиты отчета, умения вести научную дискуссию и отвечать на вопросы.

Оценка «хорошо» выставляется в случае посещения не менее 75% лекционных и 100% практических занятий, выполнения всех заданий, выполнения практических исследований и защиты отчета.

Оценка «удовлетворительно» выставляется в случае посещения не менее 50% лекционных и 100% практических занятий, выполнения всех заданий, выполнения практических исследований и представления отчета.

## 11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/enrol/index.php?id=26850>

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

в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.

г) Методические указания по проведению лабораторных работ.

д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов / В. Шмидт – М : Техносфера, 2007. – 368 с.

– Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. Пер. с англ./ К. Бенуэлл – М : Мир, 1985. – 384 с.

– Пентин Ю. А. Основы молекулярной спектроскопии/ Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина М. : Мир БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 398 с.

– Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии/ Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков – М : Мир «ООО Издательство АСТ», 2003. – 683 с.

– Юинг Г. Инструментальные методы химического анализа: Пер. с англ. / Г. Юинг – М. : Мир, 1989.

– Кизель В. А. Отражение света / В. А. Кизель – М. : Наука, 1973. – 351 с.

– Кубелка П. Спектроскопия отражения (Теория, методы, техника) / П. Кубелка. - М. : Мир, 1978.

б) дополнительная литература:

– Stuart B. Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications / New York John Wiley & Sons, 2004. – 228 p.

– Richard L. Raman spectroscopy for chemical analysis / L. Richard, New York John Wiley & Sons. 2000. – 420 p.

– Лебедева В.В. Инструментальная оптика/ В.В. Лебедева – М. Физ. фак-т МГУ им. М. В. Ломоносова, 2005. – 282 с.

– Харрик Н. Спектроскопия внутреннего отражения/ Н. Харрик - 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) ресурсы сети Интернет:

– 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 OneNote, 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.

Лаборатория, оборудованная УФ-вид, ИК- и КР-спектрометрами.

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

### 15. Информация о разработчиках

Изаак Татьяна Ивановна, канд. хим. наук, доцент, кафедра аналитической химии Национального исследовательского Томского государственного университета.