

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Кубанский государственный университет»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор

_____ Хагуров Т.А.
« 29 » _____ 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Б1.В.ДВ.02.01 "ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА
СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА"**

Направление подготовки – 04.04.01 Химия

Направленность - Аналитическая химия

Квалификация выпускника – магистр

Форма обучения – очная

г. Краснодар
2020

Рабочая программа дисциплины «Теория и практика спектральных методов анализа» составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки РФ № 1042 от 23.09.2015.

Рабочую программу составил:

профессор кафедры
аналитической химии,
д.х.н., профессор

М.Ю. Бурьлин

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры (выпускающей)
аналитической химии «15» мая 2020 г., протокол № 6.
Заведующий кафедрой (разработчика)
д.х.н., профессор Темердашев З.А.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета
химии и высоких технологий «25» мая 2020 г., протокол № 5.
Председатель УМК факультета химии и высоких технологий
Беспалов А.В.

Эксперт:
Генеральный директор ООО
«Интеллектуальные композиционные решения»,
к.х.н.

Петров Н.Н.

1. Цели и задачи освоения дисциплины

1.1. Цель дисциплины:

- Овладение магистрантами современными теоретическими представлениями и практическими навыками по применению в научно-исследовательской работе и рутинной производственной практике современных методов инструментального анализа: электротермической атомно-абсорбционной спектрометрии (ЭТААС) и масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (МС-СИП), для успешного решения актуальных задач в различных областях науки, производства и жизнедеятельности человека.

1.2. Задачи дисциплины:

– ознакомление с особенностями методов ЭТААС и МС-ИСП, их возможностей, преимуществ и ограничений, способов интерпретации измеряемых аналитических сигналах, закономерностей протекающих взаимодействий;

– формирование умений самостоятельно пополнять и систематизировать полученные знания, подбирать и адаптировать к имеющимся условиям схемы ЭТААС и МС-ИСП анализа конкретных веществ и материалов;

– развитие мыслительных и творческих способностей студентов при проведении научно-исследовательской работы по разработке аналитических методик, развитию методов аналитики в целом и выполнении рутинных анализов.

1.3 Место дисциплины в структуре ООП ВО

Дисциплина Б1.В.ДВ.02.01 «Теория и практика спектральных методов анализа» относится вариативной части (дисциплина по выбору) Блока 1 "Дисциплины (модули)" учебного плана и является логическим продолжением разделов базовой (Б1.Б.4) части и служит основой для последующего изучения разделов обязательной (Б1.Б.3), вариативной и курсов по выбору ООП. Она логически и информационно связана со следующими дисциплинами:

- «Современная аналитическая химия»;
- «Актуальные задачи современной химии»;
- «Объекты окружающей среды и их аналитический контроль».

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1	ПК-2	Способность осуществлять научно-исследовательскую деятельность по решению фундаментальных и прикладных задач аналитической химии с использованием теоретических и практических знаний и навыков в избранной области химии	Современный теоретический уровень и возможности спектральных методов анализа (атомно-абсорбционной спектроскопии, масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой, атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой).	Работать на современном аналитическом спектральном оборудовании (атомно-абсорбционный спектрометр, ИСП-МС); выполнить аналитические определения по известным методикам; интерпретировать результаты измерений.	Опытной исследовательской работы на серийном спектральном оборудовании, применяемой в аналитических исследованиях

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 6 зачетные единицы (216 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры (часы)	
		1	2
		-	3
Контактная работа, в том числе:	62,3		62,3
Аудиторные занятия (всего):			
Занятия лекционного типа	28	-	28
Лабораторные занятия	34	-	34
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	-	-	-
Иная контактная работа:			
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,3	-	0,3
Самостоятельная работа, в том числе:			
Курсовая работа	-	-	-
Проработка учебного (теоретического) материала	100	-	100

Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)	-	-	-
Реферат	-	-	-
Подготовка к текущему контролю	18	-	18
Контроль:			
Подготовка к экзамену	35,7	-	35,7
Общая трудоемкость	час.	216	216
	в том числе контактная работа	62,3	62,3
	зач. ед	6	6

2.2 Структура дисциплины.

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины.

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа СР
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Развитие метода атомно-абсорбционного спектрального анализа с источником сплошного спектра	18	4	-	-	14
2	Химические модификаторы матрицы (ММ)	24	4	-	8	12
3	Химические модификаторы матрицы на карбонизованной основе	26	4	-	8	14
4	Особенности практической реализации ЭТААС определения легколетучих и гидридообразующих элементов	24	2	-	10	12
5	Гидридное атомно-абсорбционное определение As, Se, Sb с концентрированием в графитовой печи	14	2	-	-	12
6	Введение в масс-спектрометрию с индуктивно связанной плазмой	16	2	-	-	14
7	Атомное строение вещества и образование атомных и молекулярных ионов	14	2	-	-	12
8	Основы устройства и работы масс-спектрометров с индуктивно связанной плазмой	20	4	-	-	16
9	Образование ионов в индуктивно связанной плазме	24	4	-	8	12
	<i>Итого:</i>		28	-	34	118

2.3 Содержание разделов дисциплины

2.3.1 Занятия лекционного типа

№ раз-	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
--------	----------------------	--------------------	-------------------------

дела			
1	2	3	4
1	Развитие метода атомно-абсорбционного спектрального анализа с источником сплошного спектра	<p>Перспективы использования атомно-абсорбционных спектрометров с источником сплошного спектра; отрицательные явления при измерениях; преодоление этих сложностей. Новые источники излучения – ксеноновые лампы высокого давления, их устройство, характеристики излучения. Новый класс фотоэлектрических приемников – светочувствительные твердотельные полупроводниковые детекторы. Оптическая схема спектрометров с источником сплошного спектра. Эшелле-монохроматор. Измерение сигналов – атомного характеристического и неселективного.</p> <p>Пламенная атомизация, молекулярно абсорбционный анализ, электротермическая атомизация, изотопный анализ, ртутно-гидридная техника, многоэлементный анализ. Достоинства атомно-абсорбционных спектрометров высокого разрешения с непрерывным источником спектра. Недостатки таких приборов.</p>	Опрос
2	Химические модификаторы матрицы (ХМ)	<p>Технологии химического модифицирования матрицы и анализа суспензий в электротермической атомно-абсорбционной спектрометрии. Классификация ХМ. Эффекты модифицирования. Модификаторы матрицы при ЭТААС определении легколетучих и гидридобразующих элементов. Техника дозирования суспензий.</p>	Собеседование
3	Химические модификаторы матрицы на карбонизованной основе	<p>Синтез и свойства новых сорбентов-модификаторов на основе карбонизованных материалов. Макро- и микроструктурные свойства синтезированных палладий- и никельсодержащих материалов. Химическое состояние компонентов сорбентов-модификаторов. Модифицирующие свойства сорбентов-модификаторов при ЭТААС определении гидридобразующих и легколетучих элементов. Термодинамическое моделирование термохимических процессов с участием металлосодержащих модификаторов на основе активированного угля. Кинетические исследования процессов атомизации элементов с участием таких химических модификаторов.</p>	Опрос
4	Особенности практической реализации ЭТААС определения легколетучих и гидридобразующих элементов, в том числе и с	<p>Определение свинца и кадмия в образцах с высоким содержанием органической матрицы. Определение As и Se в растительных материалах. Определение селена в почвах. Определение Cd в донных осадках. Определение гидридобразующих элементов в природных и питьевых водах. Многоэлементное атомно-абсорбционное определение. Методические аспекты определения ртути по методу холодного пара.</p>	Собеседование

	использованием химических модификаторов		
5	Гидридное атомно-абсорбционное определение As, Se, Sb с концентрированием в графитовой печи	Метод генерации газообразных гидридов; атомизация элементов; экспериментальные схемы ЭТААС анализа гидридов; физико-химические условия эффективной генерации газообразных гидридов; методы накопления (концентрирования) и атомизации гидридов определяемых элементов; используемые для этой цели сорбенты (модификаторы, покрытия); примеры аналитического применения.	Опрос
6	Введение в масс-спектрометрию с индуктивно связанной плазмой	Появление метода, его применение, достоинства метода, недостатки метода, сравнение с другими методами, распространение метода в мире и в России, информационная поддержка метода.	Собеседование
7	Атомное строение вещества и образование атомных и молекулярных ионов	Строение атома; элементарные частицы; дефект масс; электронная оболочка атома; изотопы; атомная масса элемента; молекулы. Термический нагрев моноатомных газов; термический нагрев молекулярных газов; нагрев газов электромагнитными полями; физические свойства плазмы. Общие сведения о процессах испарения, диссоциации, атомизации и ионизации; влияние операционных параметров плазменной горелки спектрометра на процессы ионизации; образование положительных однозарядных и двухзарядных атомных ионов; образование полиатомных ионов (оксидные, гидроксидные, гидридные ионы; аргиды); образование отрицательных ионов; физические особенности и достоинства индуктивно связанной плазмы как источника ионов для масс-спектрометрии.	Опрос
8	Основы устройства и работы масс-спектрометров с индуктивно связанной плазмой	Блок-схема спектрометра с квадрупольным масс-анализатором; индуктивно связанная плазма; основные внутренние и периферийные компоненты генератора высокочастотной индуктивно связанной плазмы; назначение плазменной горелки масс-спектрометра, конструкционная схема горелки спектрометра и ее работа; процессы при трансформации водного аэрозоля при движении его по горелке и факелу плазмы, физические характеристики факела плазмы. Назначение и устройство ионной оптики масс-спектрометра, эволюция конструкций.	Собеседование
9	Ионная оптика масс-спектрометров с индуктивно связанной плазмой	Этапы развития ионной оптики в МС-ИСП, симметричная оптика, система сэмплер–скиммер, обеспечение условий вакуумирования оптики, несимметричная ионная оптика, устройства и узлы управления ионным пучком, технические характеристики для описания ионной оптики.	Опрос

2.3.2 Занятия семинарского типа

(учебным планом занятия семинарского типа не предусмотрены)

2.3.3 Лабораторные занятия

В основе построения лабораторного практикума «Теория и практика спектральных методов анализа» заложены современные достижения в электротермической атомно-абсорбционной спектроскопии, ИСП-МС, разработке и применении химических модификаторов.

№	Тема	Форма текущего контроля
1.	Применение химических модификаторов матрицы при ЭТААС определении токсичных элементов: - в природных и морских водах; - в пищевых продуктах, винах и напитках.	Отчет по лабораторной работе (презентация)
2.	Применение химических модификаторов матрицы на карбонизованной основе при ЭТААС определении токсичных элементов: - в природных и морских водах; - в пищевых продуктах, винах и напитках.	Отчет по лабораторной работе (презентация)
3.	ЭТААС определение As в почвах с дозированием суспензий проб и по методу генерации гидридов	Отчет по лабораторной работе (презентация)
4.	МС-ИСП определение примесных компонентов в природных объектах и пищевых продуктах	Отчет по лабораторной работе (презентация)

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

(Курсовые работы – не предусмотрены)

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы студентов, обучающихся по дисциплине

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа,
- в форме аудиофайла,
- в печатной форме на языке Брайля.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа,
- в форме аудиофайла.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии

Для формирования профессиональных компетенций в процессе освоения курса используется технология профессионально-развивающего обучения, предусматривающая не только передачу теоретического материала, но и стимулирование и развитие продуктивных познавательных действий студентов (на основе психолого-педагогической теории поэтапного формирования умственных действий). Активизации и интенсификации познавательного процесса способствуют использование моделирование проблемных ситуаций, мультимедийные презентации в лекционном курсе. В рамках лабораторных занятий проводится устный опрос освоенного материала и обсуждение в студенческих исследовательских группах результатов измерений.

Семестр	Вид занятий (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
3	Л	Моделирование проблемных ситуаций, лекция-конференция	2
	ПЗ	–	–
	ЛР	Устный опрос освоенного материала и обсуждение в студенческих исследовательских группах результатов измерений	4
	Итого:		6

Подготовка доклада с компьютерной презентацией. Доклад (устное сообщение) по реферату представляет собой краткое (5–7 мин) изложение сути выполненной работы, сопровождающееся компьютерной презентацией. Последняя должна включать не более 12–15 слайдов.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль осуществляется в устной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде опроса и собеседования при сдаче лабораторных работ. Итоговый контроль осуществляется в виде экзамена.

4.1 Примеры вопросов для собеседования и текущего контроля успеваемости

1. Назовите методы измерения поглощения света атомами (по работе Б.В. Львова Атомно-абсорбционный спектральный анализ – М.: Наука. 1966 г.).

2. Какие эффекты могут быть достигнуты при использовании в схеме атомно-абсорбционных измерений источников сплошного спектра вместо традиционных селективных источников спектра?

3. Перечислить специфические требования, которым должен удовлетворять атомно-абсорбционный спектрометр с непрерывным источником спектра, приемлемый для

коммерческого производства.

4. Назовите технические сложности, которые возникают при решении задачи создания спектрометра высокого разрешения с источником сплошного спектра.
5. Симметричная ионная оптика. Отбор пробы плазмы в ионную оптику.
6. Обеспечение вакуумной системой ионной оптики масс-спектрометров с ИСП.
7. Ассиметричная ионная оптика масс-спектрометров с ИСП.

4.2. Пример экзаменационного билета

КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет химии и высоких технологий

Экзамен по дисциплине “Теория и практика спектральных методов анализа”

Направление подготовки – 04.04.01 Химия

Профиль подготовки – «Аналитическая химия»

Билет № 1

1. Конструкция и характеристики источника сплошного спектра, используемого в высокоразрешающем атомно-абсорбционном спектрометре с источником сплошного спектра.
2. Модификаторы на основе металлов платиновой группы: способы применения, эффекты действия, механизм действия, примеры использования.
3. Физические свойства плазмы.

Заведующий кафедрой аналитической

химии, д.х.н., профессор _____

З.А. Темердашев

5. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1. Основная литература

1. А.А. Пупышев. Атомно-абсорбционный спектральный анализ. М.: «Техносфера». 2009. – 784 с.
2. А.А. Ганеев, С.Е. Шолупов, А.А. Пупышев, А.А. Большаков, С.Е. Погарев. Атомно-абсорбционный анализ: Учебное пособие. – СПб.: Издательство «Лань», 2011. – 304 с.
3. Бёккер Ю. Спектроскопия. Под ред. А.А. Пупышева, М.В. Поляковой. – М.: Техносфера, 2009.
4. Васильева В.И., Стоянова О.Ф., Шкутина И.В., Карпов С.И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство. – СПб.: Издательство «Лань», 2014. – 416 с.

<https://e.lanbook.com/reader/book/50168/#4>

5.2. Дополнительная литература

1. Бурылин М.Ю., Темердашев З.А. Атомно-абсорбционное определение легколетучих и гидридобразующих элементов. Краснодар: Типография «Арт-Офис». 2007. – 217 с.
2. Отто М. Современные методы аналитической химии. – М.: Техносфера, 2008. – 281 с.
3. Мак-Махон Дж. Аналитические приборы. Руководство по лабораторным, портативным и миниатюрным приборам. – СПб.: Центр образовательных программ Профессия, 2009. – 366 с.

5.3. Периодические издания

1. «Журнал аналитической химии», Россия, Москва.
2. «Заводская лаборатория. Диагностика материалов», Россия, Москва.
3. «Аналитика и контроль», Россия, Екатеринбург.

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. Масс-спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой. Образовательный ресурс. <http://www.icp-ms.ru/>
2. «Обучение инструментальным методам анализа без учебника». Сборник ссылок на сетевые ресурсы по аналитическим методам химии. http://www.asdlib.org/onlineArticles/ecourseware/Spudich/Spudich_ASDL_Chem520.pdf
3. Российский химико-аналитический портал. <http://www.anchem.ru/>
4. Библиографическая и реферативная база данных научных статей «Scopus». <http://www.scopus.com/>
5. Брошюра фирмы «PerkinElmer» «Сравнение аналитических возможностей методов атомной спектрометрии». http://www.perkinelmer.com/PDFs/downloads/BRO_WorldLeaderAAICPMSICPMS.pdf
6. Веб-ресурс издательства «Wiley»: новости, вебинары, книги, учебные материалы, видео по спектрометрическим методам. <http://www.spectroscopynow.com/>
7. Журнал «Spectrochimica Acta, Part B: Atomic Spectroscopy», издательство Elsevier, Нидерланды. <http://www.sciencedirect.com/science/journal/05848547>
8. Журнал «Analytical Methods», издательство RSC, Великобритания. <http://www.rsc.org/journals-books-databases/about-journals/analytical-methods/>
9. Журнал «Journal of Analytical Atomic Spectrometry», издательство RSC, Великобритания. <http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/ja#!recentarticles&adv>

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Общие рекомендации

Успешное освоение дисциплины предполагает активное, творческое участие студента

путем планомерной, повседневной работы.

Изучение дисциплины следует начинать с проработки рабочей программы, особое внимание, уделяя целям и задачам, структуре и содержанию курса.

Работа с конспектом лекций

Просмотрите конспект сразу после занятий, отметьте материал конспекта лекций, который вызывает затруднения для понимания. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции.

Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.

Выполнение лабораторных работ

На занятии получите у преподавателя график выполнения лабораторных работ. Обзаведитесь всем необходимым методическим обеспечением.

Перед посещением лаборатории изучите теорию вопроса, предполагаемого к исследованию, ознакомьтесь с руководством по соответствующей работе и подготовьте протокол проведения работы, в который занесите:

- название работы;
- заготовки таблиц для заполнения экспериментальными данными наблюдений;
- уравнения химических реакций превращений, которые будут осуществлены при выполнении эксперимента;
- расчетные формулы.

Оформление отчетов должно проводиться после окончания работы в лаборатории.

Для подготовки к защите отчета следует проанализировать экспериментальные результаты, сопоставить их с известными теоретическими положениями или справочными данными, обобщить результаты исследований в виде выводов по работе, подготовить ответы на вопросы, приводимые в методических указаниях к выполнению лабораторных работ.

8. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

- атомно-абсорбционный спектрометр AA-6800 (Shimadzu, Германия);
- атомно-абсорбционный спектрометр contrAA-800 (Германия);
- масс-спектрометр с индуктивно связанной плазмой ISP-MS XSeries2 (Thermo Scientific, USA).

Для студентов должны быть доступны персональные компьютеры с пакетом

необходимых программ.

Занятия по дисциплине проводятся в специализированных (приспособленных) учебных аудиториях. Для проведения лекций используются аудитории лекционного типа. Лекционная аудитория должна быть оснащена оборудованием для демонстрации электронных презентаций.

Для проведения лабораторных работ используются специализированные лаборатории, оснащенные вышеуказанным аналитическим оборудованием.

Самостоятельная работа студентов осуществляется в читальных залах библиотеки КубГУ, зале реферативных журналов, вычислительном центре КубГУ, а также в других аудиториях факультета химии и высоких технологий с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечения доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.