

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

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,  
качеству образования – первый  
проректор

Хатуров Т.А.

подпись

« 24 »

2018 г.



## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.ДВ.07.02 МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Направление подготовки/специальность 04.03.01 Химия

Направленность (профиль): Аналитическая химия

Программа подготовки Прикладная

Форма обучения очная

Квалификация (степень) выпускника

Бакалавр

Краснодар 2018

Рабочая программа дисциплины Б1.В.ДВ.07.02 МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.03.01 Химия

Программу составила:

Починок Т.Б., доцент кафедры аналитической химии,  
к.х.н., доцент



Рабочая программа дисциплины Молекулярная спектроскопия утверждена на заседании кафедры Аналитической химии протокол № 5 « 19» апреля 2018г.  
Заведующий кафедрой (разработчика и выпускающей кафедрой) Темердашев З.А.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета Химии и высоких технологий протокол № 5 « 20 » апреля 2018г.  
Председатель УМК факультета Стороженко Т.П.



Рецензент:  
Генеральный директор ООО "ЭИР - ЛАБ"

Диденко Д.А.

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины (модуля).

### 1.1 Цель освоения дисциплины

Формирование и развитие у студентов компетенций, позволяющих им в дальнейшем осуществлять профессиональную деятельность, посредством освоения теоретических и экспериментальных основ наиболее распространенных методов атомной и молекулярной спектроскопии.

### 1.2 Задачи дисциплины.

В соответствии с требованиями ФГОС ВО по формированию компетенций, которыми должны обладать студенты, задачами освоения дисциплины являются:

- изучение основ атомно-абсорбционной спектроскопии и спектрофотометрического анализа;
- приобретение навыков химического эксперимента, навыков работы на современной учебно-научной аппаратуре и на серийной аппаратуре, применяемой в аналитических и физико-химических исследованиях;
- изучение особенностей анализа различных объектов.

### 1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Молекулярная спектроскопия» относится к вариативной части Блока 1 "Дисциплины (модули)" учебного плана. Информационно и логически связана со следующими дисциплинами:

- Аналитическая химия;
- Физические методы анализа (основы спектроскопических методов анализа);
- Неорганическая химия (свойства неорганических веществ и химических элементов);
- Физика (оптика, атомная спектроскопия);
- Математика (методы математической статистики).

Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее для дисциплин вариативной части «Радиоспектроскопические методы в анализе», «Современные методы контроля объектов окружающей среды», «Методы экоаналитического контроля», «Мониторинг среды обитания» и ряда других дисциплин по выбору вариативной части учебного плана подготовки бакалавров по направлению 04.03.01 Химия.

### 1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся общепрофессиональных и профессиональных компетенций ОПК-1; ОПК-2; ПК-2; ПК-4

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	<b>ОПК-1</b>	Способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	принципы и теоретические основы оптических методов анализа	Рассчитывать концентрацию аналита по результатам измерения аналитического сигнала	Приемами перехода от величины аналитического сигнала к концентрации анализируемого компонента

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
2.	ОПК-2	Владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	принципы оптических методов исследования состава веществ	выполнять несложные анализы и интерпретировать полученные результаты анализов.	Методологией применения основных приемов определения концентрации аналита
3	ПК-2	Владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Назначение и принцип работы приборов, применяющихся в спектрофотометрии	Сопоставлять возможности и области применения приборов разного типа	опытом работы на серийной аппаратуре, применяемой в аналитических исследованиях
4	ПК-4	Способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	формулировки химических законов и их применение для обоснования отдельных методов анализа; основные базы данных в области химии и химического анализа.	сопоставлять теоретические сведения об объектах и методах анализа с содержанием решаемых задач; пользоваться справочной литературой и базами данных в области химии; обсуждать результаты анализа с привлечением справочных данных.	методологией проверки результатов химического анализа с привлечением справочных данных.

## 2. Структура и содержание дисциплины.

### 2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ.

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зач.ед. (180 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры (часы)			
		5	6	-	-
<b>Контактная работа, в том числе:</b>	126,4	56,2	70,2		
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>					
В том числе:					

Занятия лекционного типа	36	18	18		
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	-	-	-		
Лабораторные занятия	70	36	34		
<b>Иная контактная работа:</b>					
Контроль самостоятельной работы (в том числе курсовая работа в 6 семестре)	20	2	18		
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,4	0,2	0,2		
<b>Самостоятельная работа, в том числе:</b>	<b>53,6</b>	<b>15,8</b>	<b>37,8</b>		
<i>Проработка учебного (теоретического) материала</i>	12	4	8		
<i>Курсовая работа (подготовка, написание)</i>	25	5	20		
<i>Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)</i>					
<i>Подготовка к текущему контролю</i>	16,6	6,8	9,8		
<b>Контроль:</b>					
Подготовка к экзамену	-	-	-		
Общая трудоемкость час	Час.	180	72	108	
	В том числе контактная работа	126,4	56,2	70,2	
	зач. ед.	5	2	3	

## 2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам (темам) дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 5 семестре (*очная форма*)

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

№ раздела	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1	Теоретические основы спектрофотометрии. Измерительная аппаратура	10	4	-	4	2
2	Метрология спектрофотометрического метода анализа	10	4	-	4	2
3	Различные приемы улучшения метрологических характеристик методик спектрофотометрии	12	2	-	8	2
4	Определение состава и прочности комплексных соединений	14	4	-	8	2
5	Определение констант кислотности (основности) реагентов	11,8	2	-	6	1,8
6	Органические реагенты в спектрофотометрии. Устранение мешающего влияния посторонних веществ	10	2	-	6	1

№ раз-дела	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
	Курсовая работа	5				5
	<i>Итого по дисциплине:</i>		18	-	36	15,8

Разделы (темы) дисциплины, изучаемые в 6 семестре (очная форма)

№ раз-дела	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Теоретические основы ИК-спектроскопии. Виды и особенности колебаний. Интерпретация спектров. Приборы. Особенности пробоподготовки.	26	6	-	12	4
2	Основы люминесцентного метода анализа. Люминесценция. Законы люминесценции. Спектры люминесценции. Оборудование.	22	4	-	10	4
3	Сравнительная характеристика методов молекулярной спектроскопии. Аналитические характеристики методов молекулярной спектроскопии. Чувствительность, воспроизводимость, селективность.	9	4	-	-	5
4	Применение методов молекулярной спектроскопии в химическом анализе. Примеры применения методов для решения экологических задач.	19,8	4	-	12	4,8
	Курсовая работа	20				20
	<i>Итого:</i>		18	-	34	37,8

## 2.3 Содержание разделов дисциплины:

### 2.3.1 Занятия лекционного типа.

#### 5 семестр

№	Тема	Форма текущего контроля
1	Взаимодействие молекул с электромагнитным излучением в видимой и УФ-областях спектра. Связь между электронным строением окрашенных соединений и их окраской. Теории Фаянса, осциллирующего электрона, теория строения органических соединений. Спектры поглощения. Изобестическая точка. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Основные приемы определения концентрации растворов при соблюдении и несоблюдении закона Бугера-Ламберта-Бера. Принципы подбора светофильтров. Измерительные приборы. Основные узлы спектрофотометрической аппаратуры Условия и факторы, способствующие выполнению закона Бугера-Ламберта-Бера. Требования к прочности комплексных соединений, постоянству состава поглощающих соединений, рН. Расчет необходимого избытка реагента, устранение влияния светопоглощения реагента.	Устный опрос
2	Метрология спектрофотометрического анализа. Точность. Предел обнаружения, диапазон определяемых концентраций. Пути повышения чувствительности метода. Дифференциальная спектрофотометрия и ее основные приемы: метод высокого поглощения, метод низкого поглощения, метод предельной точности.	Устный опрос
5	Применение экстракционно-фотометрического анализа для повышения селективности и чувствительности спектрофотометрического метода. Использование каталитического варианта кинетических методов анализа в фотометрии. Применение фотохимических реакций для повышения чувствительности фотометрического метода анализа. Анализ многокомпонентных систем.	Устный опрос Защита ЛР
6	Методы определения состава комплексных соединений. Методы изомолярных серий, молярных отношений, Асмуса, отношения наклонов (Гарвея-Меннинга) и др.	Расчетное задание Защита ЛР Устный опрос
7	Методы определения констант кислотной диссоциации: расчетные и графические. Методы определения констант устойчивости комплексных соединений: Бабко, графические методы Франка-Освальда, Шварценбаха и др.	Расчетное задание Устный опрос Защита ЛР
8	Типы окрашенных соединений, применяемых в фотометрии. Комплексы с неорганическими и органическими лигандами. Гетерополикомплексы. Основные органические реагенты, особенности работы с ними. Применение органических реагентов для устранения мешающего влияния посторонних веществ. Перспективы развития спектрофотометрического метода анализа.	Устный опрос

### 2.3.2 Занятия семинарского типа.

**Практические занятия – не предусмотрены**

### 2.3.3 Лабораторные занятия.

#### 5 семестр

№	Темы лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	Определение фосфора по реакции образования гетерополикомплексов	Защита ЛР
2	Определение свинца методом твердофазной спектроскопии по реакции с бромпирогаллоловым красным	Защита ЛР
	Определение кобальта методом спектроскопии диффузного отражения на пенополиуретане	Защита ЛР
1	Экспериментальное определение молярных коэффициентов поглощения и концентрации двух окрашенных соединений в растворе при их совместном	Защита ЛР

	присутствии	
2	Подбор оптимальных условий для изучения состава и прочности комплекса цинка с ксиленоловым	Защита ЛР
3	Определение состава комплекса цинка с ксиленоловым оранжевым методом Асмуса	Защита ЛР
4	Определение константы устойчивости комплекса цинка с ксиленоловым оранжевым методом Бабко	Защита ЛР расчетное задание
5	Определение состава и прочности комплекса свинца с ЭДТА с использованием различных приемов	Защита ЛР Расчетное задание
6	Определение константы кислотной диссоциации двуцветного реагента графическим методом и по поглощению солевой формы	Защита ЛР Расчетное задание
7	Экстракционно-фотометрическое определение кадмия по поглощению его соединения в УФ области спектра	Защита ЛР
8	Изучение селективности методики фотометрического определения	Защита ЛР

*Ко всем лабораторным работам имеются методические указания, утвержденные на кафедре аналитической химии КубГУ*

### **2.3.4 Занятия лекционного типа.**

#### **6 семестр**

№	Тема	Форма текущего контроля
1.	Теоретические основы ИК-спектроскопии. Виды и особенности колебаний. Интерпретация спектров. Приборы. Особенности пробоподготовки.	Устный опрос. Контрольная работа
2.	Люминесценция. Законы люминесценции. Спектры люминесценции. Оборудование.	Устный опрос. Самостоятельная работа
3.	Сравнительная характеристика методов молекулярной спектроскопии. Аналитические характеристики методов молекулярной спектроскопии. Чувствительность, воспроизводимость, селективность.	Устный опрос. Контрольная работа
4.	Применение методов молекулярной спектроскопии в химическом анализе. Примеры применения методов для решения экологических задач.	Устный опрос. Самостоятельная работа

### **2.3.5 Занятия семинарского типа.**

Практические занятия – не предусмотрены

### **2.3.6. Лабораторные занятия в 6 семестре**



№	Тема	Форма текущего контроля
1	Экстракционно-фотометрическое определение кадмия по поглощению его соединения в УФ области спектра	Защита ЛР
2	Изучение селективности методики спектрофотометрического определения аналита	Защита ЛР
3	Определение состава неизвестного полимерного материала на ИК-спектрофотометре FTIR. Работа с библиотеками ИК-спектров	Защита ЛР
4	ИК-спектроскопическое определение содержания нефтепродуктов в природных водах.	Защита ЛР

*Ко всем лабораторным работам имеются методические указания, утвержденные на кафедре аналитической химии КубГУ*

### 2.3.7 Курсовые работы – предусмотрены учебным планом в 6 семестре

#### Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Определение карнозина в мясосодержащей продукции
Выбор вещества-стандарта для определения аминокислот в яблочном соке
Установление возможности оценки количественного значения показателя антиоксидантная активность черного чая «Краснодарский»
Установление возможности оценки количественного значения показателя Фолина–Чиокальтео (суммарное содержание полифенольных соединений) черного чая «Краснодарский»
Выбор условий определения антиоксидантной активности пищевых продуктов (на примере чая) в индикаторной системе с генерированием радикалов
Оценка возможности использования показателя АОА при составлении лекарственных сборов
Косвенная оценка антиоксидантной активности чая по величине Eh настоев
Изучение возможности косвенного определения общего белка методом сорбционной спектроскопии на желатиновой матрице
Определение кофеина в некоторых напитках и биожидкостях человека методами хромато-масс-спектрометрии
Разработка способа подготовки проб сточных вод, загрязненных нефтепродуктами, для целей ИВ-определения тяжелых металлов
Исследование формирования аналитического сигнала при сорбционно-рентгенофлуоресцентном определении элементов на фоне сложной аналитической матрицы
Исследование сорбции органических реагентов на оксиде алюминия
Исследование сорбционного концентрирования ионов меди на иммобилизованном оксиде алюминия
Оценка эффективности модификаторов-окислителей при атомно-абсорбционном определении элементов в пробах с высоким содержанием органической матрицы
Изучение мультиэлементного состава вин юга России
Определение ртути в водах методом АЭС-ИСП с генерацией гидридов
Определение стимуляторов и канабимметиков в биологических жидкостях человека методами хромато-масс-спектрометрии

Сорбционно-спектроскопическое определение тяжелых металлов в природных и сточных водах с использованием силикагелей с иммобилизованной гуаназильной группой
Сорбционные материалы на основе 1,3-бис[(гетарил)метиленамино]гуанидина для рентгенофлуоресцентного определения тяжелых металлов в природных и техногенных водах
Изучение условий сорбционного концентрирования ионов алюминия для определения в питьевой воде
Оптимизация условий в схеме электротермического атомно-абсорбционного определения ртути в суспензиях донных отложений
Определение гистамина в пищевых продуктах флуориметрическим методом
Возможность оценки качества меда по показателю антиоксидантная активность
Установление зависимости между величинами антиоксидантной активности пива и некоторыми показателями его качества
Буферная емкость молочных продуктов как показатель их натуральности (на примере молока и сыра)
Выбор физико-химических показателей молока для установления его натуральности
Статистический анализ данных элементного состава образцов винограда, отобранных на территории Темрюкского района
Статистический анализ данных элементного состава образцов почв Темрюкского района, используемых под возделывание винограда
Исследование закономерностей взаимодействия красителей группы 3,4,5-тригидроксифлуоронов с молекулами белков
Исследование свойств химических модификаторов на основе церия для электротермического атомно-абсорбционного определения элементов
Влияние микроволнового излучения на экстракцию биологически активных веществ из зверобоя продырявленного
Определение антоцианов в красных сухих винах
Исследование поведения индивидуальных антиоксидантов в системе, содержащей комплекс Fe(III)-органический реагент
Сочетание рентгенофлуоресцентного детектирования и микроэкстракционного концентрирования для определения низких содержаний тяжелых металлов в природных водах
Электротермическое атомно-абсорбционное определение никеля в донных отложениях с использованием техники фотохимической генерации
ИСП-МС определение серебра в биологических образцах животного происхождения
Сорбционное извлечение пищевого красителя индигокармина из водных растворов оксидом алюминия
Получение азоокисей – потенциальных рострегуляторов для зерновых культур

#### 2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1	Проработка учебного (теоретического) материала	1 Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания/ сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос.ун-т, 2018. 89 с. 2. Т.Б. Починок, З.А. Темердашев. Молекулярная абсорбционная спектроскопия. Учебное пособие. Краснодар, КубГУ, 2016.

		3. Т.Б. Починок, З.А. Темердашев. Аналитическая химия. Спектроскопические методы анализа. Учебное пособие. Краснодар, КубГУ, 2013.
	Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)	1. Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания/ сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос.ун-т, 2018. 89 с. 2. Т.Б. Починок, З.А. Темердашев. Молекулярная абсорбционная спектроскопия. Учебное пособие. Краснодар, КубГУ, 2016. 3. Т.Б. Починок, З.А. Темердашев. Аналитическая химия. Спектроскопические методы анализа. Учебное пособие. Краснодар, КубГУ, 2013.
	Подготовка к текущему контролю	1. Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания/ сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос.ун-т, 2018. 89 с. 2. Т.Б. Починок, З.А. Темердашев. Молекулярная абсорбционная спектроскопия. Учебное пособие. Краснодар, КубГУ, 2016. 3. Т.Б. Починок, З.А. Темердашев. Аналитическая химия. Спектроскопические методы анализа. Учебное пособие. Краснодар, КубГУ, 2013.

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.**

В процессе освоения данной учебной дисциплины используются следующие образовательные технологии: аудиторная работа в виде традиционных форм: лекции, семинары, практические занятия и т.п.; самостоятельная работа студентов, групповые дискуссии, занятия - конференции, дебаты, регламентированная дискуссия, проводится разбор практических задач. Предусмотрены контактные часы, в рамках которых преподаватель, с одной стороны, оказывает индивидуальные консультации по ходу выполнения самостоятельных заданий, а с другой стороны, осуществляет контроль и оценивает результаты этих индивидуальных заданий. Для фиксации творческого продвижения используется система оценки знаний студентов по результатам проверки контрольных работ, применяется обсуждение результатов работы студенческих исследовательских групп. Некоторые разделы теоретического курса рассматриваются с использованием опережающей самостоятельной работы: студенты получают задание на изучение нового материала до его изложения на лекции.

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
5,6	Л, ЛР	Лекции с элементами педагогической эвристики, беседы, разбор ситуаций, работа в малых группах, презентация кратких сообщений в формате мини-конференции	50
<i>Итого:</i>			50

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

#### **4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.**

##### **4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля.**

##### **4.1.1. Вопросы к контрольным и самостоятельным работам**

##### **Вопросы к контрольным работам (5 семестр)**

1. Связь между электронным строением окрашенных соединений и их окраской.
2. Основной закон светопоглощения. Истинные и кажущиеся отклонения от него. Причины отклонений. Способы снижения погрешности, связанной с такими отклонениями. Спектры поглощения. Полуширина спектральной линии. Изобестическая точка.
3. Принципиальная схема прибора для измерения характеристик поглощения света. Источники излучения, требования к ним, их характеристики. Приемники излучения. Устройство, принцип работы. Способы монохроматизации излучения. Дисперсия призм и дифракционных решеток. Общая характеристика фотоэлектроколориметров. Общая характеристика спектрофотометров.
4. Требования к фотометрической реакции. Основные типы фотометрических реакций.
5. Основные приемы спектрофотометрии.
6. Определение истинного молярного коэффициента окрашенного соединения: общий подход, его ограничения.
7. Фотометрическое титрование: принцип, преимущества и недостатки. Виды кривых фотометрического титрования. Титрование «по наклону» и «по ступеням».
8. Дифференциальная фотометрия. Причины выигрыша в точности.
9. Спектрофотометрический анализ смеси компонентов. Метод Фирордта, условия его применимости. Производная спектроскопия: принцип метода, преимущества, недостатки. Применение в анализе многокомпонентных систем.
10. Основные этапы исследования новой фотометрической реакции.
11. Расчет необходимого избытка реагента. Принципы выбора реагента.
12. Влияние рН на величину оптической плотности, выбор оптимального значения рН. Чувствительность фотометрических методов и основные приемы повышения чувствительности.
13. Применение фотохимических реакций в фотометрическом анализе.
14. Применение каталитического варианта кинетических методов анализа в фотометрии.
15. Методы определения состава комплексных соединений. Метод изомолярных

серий: принцип, условия применимости. Методы насыщения: молярных отношений, Гарвея-Меннинга, Бента-Френча, Асмуса.

16. Определение константы устойчивости единственного комплекса: общий подход, его ограничения. Метод пересечения кривых.
17. Исследование ступенчатого комплексообразования в растворе, общий подход. Требования к системе при спектрофотометрическом исследовании.
18. Методы определения констант кислотной диссоциации окрашенных реагентов: расчетный, графический, по величине молярного поглощения солевой формы.
19. Экстракционная фотометрия: принцип метода, преимущества и недостатки. Количественные характеристики экстракции. Экстракция комплексных соединений, выбор оптимальной концентрации реагента и величины pH. Важнейшие органические реагенты в аналитической химии.

### Примеры расчетных задач

1. Определите состав комплекса кадмия с органическим лигандом, его молярный коэффициент поглощения и константу устойчивости по следующим данным:

№	V 1*10 <sup>-4</sup> М Cd(II), мл	V 1*10 <sup>-4</sup> М L, мл	A
0	10	0	0
1	9	1	0,09
2	8	2	0,18
3	7	3	0,28
4	6	4	0,38
5	5	5	0,47
6	4	6	0,56
7	3	7	0,63
8	2	8	0,57
9	1	9	0,28
10	0	10	0

2. Для определения состава комплекса железа с 1-нитрозо-2-нафтолом использовали метод отношения наклонов. Определите состав комплекса по следующим данным:

1 серия, C(Fe) = const		2 серия, C(L) = const	
C(L), М	A	C(Fe), М	A
4,3*10 <sup>-6</sup>	0,095	1,4*10 <sup>-6</sup>	0,100
8,6*10 <sup>-6</sup>	0,196	2,9*10 <sup>-6</sup>	0,220
1,3*10 <sup>-5</sup>	0,296	4,3*10 <sup>-6</sup>	0,320
1,7*10 <sup>-5</sup>	0,390	5,7*10 <sup>-6</sup>	0,410

3. Ион никеля (II) образует с реагентом R хелат NiR, поглощающий при 395 нм. Ионы никеля и реагента не обладают заметным поглощением при этой длине волны. Если в растворе присутствует 10-кратный избыток реагента по отношению к иону никеля, то оптическая плотность этого раствора зависит только от концентрации никеля. Рассчитать молярный коэффициент поглощения комплекса и его константу устойчивости по следующим данным:

C (Ni), М	C(R), М	A при l=
-----------	---------	----------

		1 см
$2,5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	0,765
$2,5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$	0,360

4. Для приготовления раствора сравнения 0,258 г нитрата свинца растворили в 250 мл воды. После обработки 5 мл раствора дитизоном было получено 50 мл окрашенного раствора. Окрашенное соединение экстрагировали 10 мл хлороформа, и оптическая плотность хлороформного слоя оказалась 0,35. Навеску исследуемого сплава 1 г растворили в кислоте и разбавили раствор водой до 100 мл. После обработки 10 мл этого раствора дитизоном было получено 25 мл окрашенного раствора. Окрашенное соединение экстрагировали 10 мл хлороформа, и оптическая плотность хлороформного слоя в той же кювете оказалась 0,24. Определить содержание свинца в сплаве (в %).

5. Фотометрическим методом определяют содержание  $\text{Fe}^{3+}$  в виде моносulfосалицилатного комплекса. Фотометрическую реакцию проводят при  $\text{pH}=2$  и концентрации реагента  $C_R=10^{-2}$  М. Рассчитайте относительную реакционную погрешность определения  $\text{Fe}^{3+}$  в этих условиях, если примерная концентрация  $\text{Fe}^{3+}$  составляет  $10^{-4}$  М.

6. Рассчитайте объем 5%-ного раствора сульфосалицилата натрия, который следует вводить на каждые 50 мл фотометрируемого раствора при определении содержания  $\text{Fe}^{3+}$  в виде моносulfосалицилата при  $\text{pH}=2$ , если ориентировочное содержание  $\text{Fe}^{3+}$  0,5 мг?

## 6 семестр

### Вопросы к самостоятельным работам

1. Общий принцип методов молекулярной и атомной абсорбционной спектроскопии. Спектры поглощения, их графическое представление.
2. Основной закон поглощения электромагнитного излучения. Основные причины отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бера в методах ИК- спектроскопии и ААС.
3. Аналитический сигнал в методах молекулярной и атомной абсорбционной спектроскопии и приемы перехода от величины аналитического сигнала к концентрации.
4. Взаимодействие ИК-излучения с молекулами веществ. Частота колебания в приближении гармонического осциллятора.
5. Валентные и деформационные колебания. Колебания, активные в ИК-спектре.
6. Понятие о дипольном моменте отдельных химических связей и дипольном моменте молекул. Изменение дипольного момента молекул за счет валентных и деформационных колебаний атомов.
7. Объясните, почему для молекул  $\text{Br}_2$ ,  $\text{O}_2$  и других гомоядерных двухатомных молекул не удаётся зарегистрировать ИК-спектр.
8. Какие факторы влияют на частоту и интенсивность полосы поглощения определённой группы атомов?
9. Схема ИК-спектрофотометра. Основные отличия от спектрофотометров в видимой и УФ-областях.
10. . Источники ИК-излучения. Материалы кювет.
11. Спектрофотометры диспергирующего типа. Монохроматизация излучения. Основные типы детекторов ИК-излучения.
12. ИК-Фурье-спектрофотометры. Отличие от приборов диспергирующего типа. Принцип детектирования сигнала.
13. Основные преимущества ИК-Фурье-спектрофотометров. Основные аналитические характеристики – соотношение сигнал/шум; спектральный диапазон частот; время сканирования изображения и т.д.

14. Сущность качественного анализа в методе ИК-спектроскопии. Идентификационные параметры. Расшифровка спектров.
15. Аналитический сигнал в методе ИК-спектроскопии. Метод базовой линии. Переход от аналитического сигнала к концентрации.
16. Способы подготовки проб к анализу в методе ИК-спектроскопии. Особенности исследования газообразных, жидких и твердых образцов.
17. Общая характеристика метода ИК-спектроскопии. Применение метода. Примеры.
18. Люминесценция. Классификация. Спонтанная, резонансная и вынужденная люминесценция.
19. Энергетические переходы в молекулах в процессе возбуждения люминесценции. Диаграмма Яблонского. Колебательная релаксация. Внутренняя и интеркомбинационная конверсия.
20. Правило Каши. Закон Стокса-Ломмеля. Правило Левшина.
21. Энергетический и квантовый выход флуоресценции, их зависимость от различных факторов.
22. Тушение люминесценции.
23. Спектры люминесценции. Спектры возбуждения флуоресценции.
24. Качественный люминесцентный анализ.
25. Количественный люминесцентный анализ. Связь интенсивности люминесценции с концентрацией аналита. Причины отклонения от линейности. Люминесцентное титрование.
26. Основные приборы в люминесцентном методе анализа: флуориметры, спектрофлуориметры, спектрофосфориметры. Схема флуориметра. Первичные и вторичные монохроматоры, их назначение.
27. Применение и аналитические возможности метода молекулярной люминесценции.

#### **4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.**

Промежуточная аттестация проводится в форме зачета. К зачету студенты обязаны выполнить и защитить все лабораторные работы, предусмотренные программой. Промежуточная аттестация преследует цель оценить уровень формирования компетенций, развитие творческого мышления, приобретение навыков самостоятельной работы, умение применять полученные знания для решения практических задач.

Форма проведения зачета - устно или письменно устанавливается решением кафедры. Преподавателю вправе задавать студентам дополнительные вопросы по всей учебной программе дисциплины. Результат сдачи зачета заносится преподавателем в экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

#### **Критерии оценки:**

- **отметка «зачтено»** выставляется с учетом сформированности компетенций, если дан полный, правильный ответ, материал изложен в определенной логической последовательности, демонстрируется понимание сути выполненных лабораторных работ, задача решена рациональным способом.

- **отметка «незачтено»** выставляется, если ответ студента обнаруживает незнание основного содержания учебного материала, а также в случае невыполнения лабораторных работ, предусмотренных программой.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

- при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;
- при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;
- при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

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.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

### **Курсовые работы**

Темы курсовых работ утверждаются на заседании кафедры, выбор темы студентом фиксируется в специальном заявлении.

Основными целями выполнения и защиты курсовой работы являются:

- углубление, систематизация и интеграция теоретических знаний и практических навыков по направлению подготовки;
- развитие умения критически оценивать и обобщать теоретические положения;
- применение полученных знаний при решении прикладных задач по направлению подготовки;
- стимулирование навыков самостоятельной аналитической работы;
- овладение современными методами научного исследования;
- выявление степени подготовленности магистрантов к практической деятельности в современных условиях;
- демонстрация навыков публичной дискуссии и защиты научных идей, предложений и рекомендаций.

Курсовой работе должны быть присущи актуальность и новизна. Работа должна иметь научную и практическую ценность. Результаты защиты оцениваются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» и «неудовлетворительно».

Студент выполняет курсовую работу самостоятельно под руководством научного руководителя.

Научный руководитель контролирует все стадии подготовки и написания работы вплоть до ее защиты. На основании письменного заявления студента по установленной форме о закреплении избранной темы выпускающая кафедра назначает научного руководителя выпускной квалификационной работы. Руководитель регулярно консультирует студента по вопросам содержания и оформления работы, последовательности изложения вопросов, оказывает помощь в сборе дополнительной информации, информирует кафедру о положении дел у студента в части подготовки работы.



Курсовая работа имеет общепринятую структуру.  
Основные структурные элементы курсовой работы:

- Введение;
- Аналитический обзор;
- Экспериментальную часть;
- Обсуждение полученных результатов;
- Выводы (заключение);
- Список литературы.

Во введении кратко обосновывается необходимость и практическое и (или) научное значение выполняемых исследований.

Аналитический обзор должен содержать полное описание состояния изучаемой проблемы. Обзор литературных источников или степень разработанности темы работы является важной частью бакалаврской работы. Обзор литературы должен осветить степень разработанности научной проблемы и представляет собой список авторов, которые работали в области изучаемой проблемы ранее и чьи разработки прямым или косвенным образом относятся к предмету исследования.

Экспериментальная часть должна содержать подробное описание всех использованных реактивов с указанием степени их чистоты, а также используемое аналитическое оборудование. Методики выполнения всех исследований должны быть подробно описаны. Полученные экспериментальные данные приводятся в тексте работы или в приложении.

Раздел «Обсуждение результатов» включает оценку полученных результатов, объяснение полученных зависимостей, описание выявленных в ходе эксперимента закономерностей, рекомендации по практическому использованию полученных результатов.

Выводы должны содержать краткое обобщение полученных результатов и выявленных закономерностей и не являются простым перечислением выполненных работ.

### **Критерии выставления оценок за курсовую работу**

**Отлично:** Знания глубокие, осмысленные, практические умения и навыки на высоком профессиональном уровне с демонстрацией признаков самостоятельности. Курсовая работа выполнена на актуальную тему, четко формализованы цель и задачи исследования, раскрыта суть проблемы. В ходе защиты студент продемонстрировал свободное владение материалом, уверенно излагал результаты исследования, представил презентацию, в достаточной степени отражающую суть работы.

**Хорошо:** Знания достаточно глубокие, практические умения и навыки развиты на высоком профессиональном уровне, однако не демонстрируют признаков самостоятельности. ВКР выполнена на актуальную тему, четко формализованы цель и задачи исследования, Стиль изложения научный со ссылками на источники. В ходе защиты студент уверенно излагал результаты исследования, представил презентацию, в достаточной степени отражающую суть диссертации. Однако были допущены незначительные неточности при изложении материала, не искажающие основного содержания по существу, презентация имеет неточности, ответы на вопросы при обсуждении работы были недостаточно полными.

**Удовлетворительно:** Уровень знаний, умений и навыков достигает минимально допустимого уровня: недостаточно глубокие, наблюдаются лишь отдельные попытки системного мышления. ВКР выполнена на актуальную тему, формализованы цель и задачи исследования, тема раскрыта, изложение описательное со ссылками на источники, однако нет увязки сущности темы с наиболее значимыми направлениями решения проблемы и применяемыми механизмами или методами. Сформулированы предложения и рекомендации, которые носят общий характер или недостаточно аргументированы. В

ходе защиты допущены неточности при изложении материала, достоверность некоторых выводов не доказана.

**Неудовлетворительно:** Студент нарушил календарный план разработки курсовой работы, выполненной на актуальную тему, которая раскрыта не полностью, структура не совсем логична, (нет увязки сущности темы с наиболее значимыми направлениями решения проблемы и применяемыми механизмами или методами). Сформулированы предложения и рекомендации общего характера, которые недостаточно аргументированы. Допущены неточности при изложении материала, достоверность некоторых выводов не доказана. Автор не может разобраться в конкретной практической ситуации, не обладает достаточными знаниями и практическими навыками.

## **5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля).**

### **5.1 Основная литература:**

1. Основы аналитической химии: учебник для студентов вузов. Т.1,2 / под ред. Ю. А. Золотова. М.: Академия, 2014.
2. Беккер Ю. Спектроскопия/ пер. с нем. Л.Н. Казанцевой под ред. А.А.Пупышева, М.В.Поляковой. М.: Техносфера, 2009.
3. Кристиан Г. Аналитическая химия : в 2 т. / Т.1, 2 / Кристиан Г.; пер. с англ. А. В. Гармаша и др. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009.
4. Починок Т.Б., Темердашев З.А. Молекулярная абсорбционная спектроскопия. Краснодар, КубГУ, 2016.
5. Васильева, В.И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина, С.И. Карпов ; под ред. Селеменева В.Ф., Семенова В.Н.. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2014. — 416 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/50168>

### **5.2 Дополнительная литература:**

1. Основы аналитической химии: задачи и вопросы : учебное пособие для студентов университетов // [В. И. Фадеева и др.]; под ред. Ю. А. Золотова. - Изд. 2-е, испр. - М.: Высшая школа, 2002.
2. Отто М. Современные методы аналитической химии (в 2-х томах). Т.1,2 / пер. с нем. под ред. А.В.Гармаша. М.: Техносфера, 2003.
3. Марченко З., Бальцежак М. Методы спектрофотометрии в УФ и видимой областях в неорганическом анализе. БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. - 714 с.
4. Аналитическая химия. Проблемы и подходы: в 2 т. / Т. 1,2 / пер. с англ. А. Г. Борзенко и др.; под ред. Ю. А. Золотова; ред. Р. Кельнер и др. - М.: Мир: АСТ, 2004.
5. Барбалат, Ю.А. Основы аналитической химии: практическое руководство [Электронный ресурс] : руководство / Ю.А. Барбалат, А.В. Гармаш, О.В. Моногарова, Е.А. Осипова; под ред. Золотова Ю.А., Шеховцовой Т.Н., Осолка К.В.. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 465 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/97410>

### **5.3. Периодические издания:**

1. «Журнал аналитической химии», Россия, Москва.
2. «Заводская лаборатория. Диагностика материалов», Россия, Москва.
3. «Аналитика и контроль», Россия, Екатеринбург.
4. «Spectrochimica Acta. Part B», издательство Elsevier
5. «Analytical Chemistry», издательство ACS

**6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», в том числе современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы, необходимые для освоения дисциплины (модуля).**

- Поисковая платформа, объединяющая реферативные базы данных публикаций в научных журналах и патентов <http://www.webofscience.com>
- Библиографическая и реферативная база данных <https://www.scopus.com>
- Справочно-правовая система «Консультант Плюс» (<http://www.consultant.ru>)
- База данных Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU <https://elibrary.ru/>
- Федеральная государственная информационная система «Национальная электронная библиотека» <https://нэб.пф>

**7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля).**

По курсу предусмотрено проведение лекционных занятий, на которых дается основной систематизированный материал и разъясняются наиболее сложные аспекты изучаемых методов анализа.

На лабораторных занятиях студенты закрепляют полученные теоретические знания, осваивают специфику и принцип работы аналитического оборудования, способы получения аналитического сигнала и перехода к концентрации аналита. При подготовке к лабораторной работе необходимо внимательно изучить теоретический материал по данной работе, технику выполнения эксперимента, ознакомиться с инструкциями к приборам, которые используются при выполнении работы.

**Обработка результатов лабораторных работ.** Отчёт о лабораторной работе должен содержать все полученные экспериментальные результаты, необходимые расчёты и выводы. Отчёт должен предоставляться преподавателю для проверки в течение недели после выполнения лабораторной работы. Проверка лабораторной работы сопровождается собеседованием с преподавателем. Выполненными считаются только принятые преподавателем лабораторные работы!

**Важнейшим этапом курса является самостоятельная работа по дисциплине, в рамках которой студенты осуществляют** проработку учебного (теоретического) материала, подготовку к текущему и промежуточному контролю, а также выполняют индивидуальные задания (например, готовят короткие сообщения и презентации).

Перед решением задач необходимо внимательно изучить теоретический материал, проработать конспект лекции, разобрать примеры решения задач. Решение задач рекомендуется начинать с наиболее простых, близких к имеющимся в задачнике примерам. Не рекомендуется использовать готовые конечные формулы, которые выводятся в примерах решения задач. Запись в тетради должна содержать формулы и все вычисления с указанием единиц измерения. При вычислениях необходимо обращать внимание на их точность (использование нужного числа значащих цифр) и соблюдение правил округления.

**При подготовке краткого доклада с компьютерной презентацией** аргументируется актуальность темы, выявляется практическое и теоретическое значение данного исследования. Основная часть доклада раскрывает содержание темы. В заключении в краткой и сжатой форме излагаются полученные результаты, представляющие собой ответ на главный вопрос исследования. Здесь же могут намечаться и дальнейшие перспективы развития темы.

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного

контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

## **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

### **8.1 Перечень информационных технологий**

Использование электронных презентаций при проведении занятий.

### **8.2 Перечень необходимого лицензионного программного обеспечения.**

Необходимо программное обеспечение для спектрофотометра UV-1800 (Shimadzu), ИК-Фурье-спектрофотометра FTIR-8400S 8 (Shimadzu).

При выполнении лабораторных работ и подготовке кратких сообщений используется программное обеспечение Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint).

### **8.3 Перечень информационных справочных систем:**

1. Электронная библиотечная система eLIBRARY.RU <http://www.elibrary.ru>

## **9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю).**

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория
2.	Семинарские занятия	Не предусмотрены
3.	Лабораторные занятия	Лаборатория, укомплектованная специализированной лабораторной мебелью и аналитическим оборудованием в соответствии с программой лабораторных работ – атомно-абсорбционный спектрометр SpectrAA-800 (Varian, Австралия); атомно-абсорбционный спектрометр AA-6800 (Shimadzu, Германия); спектрофотометр UV-1800 (Shimadzu); спектрофотометр СФ-2000; фотометры КФК-3.
4.	Курсовое проектирование	Курсовые работы выполняются в химических лабораториях кафедры аналитической химии и УНПК «Аналит»
5.	Групповые (индивидуальные) консультации	Учебные помещения факультета химии и высоких технологий
6.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Учебные помещения факультета химии и высоких технологий
7.	Самостоятельная работа	Самостоятельная работа студентов осуществляется в читальных залах библиотеки КубГУ, зале реферативных журналов, вычислительном центре КубГУ, Интернет-центре, а также других аудиториях факультета химии и высоких технологий с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.