

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«МУРМАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ»

Методические указания  
к самостоятельной работе

По дисциплине: Б1.В.03.ДВ.01.02 Методы электронной спектроскопии  
указывается цикл (раздел) ОП, к которому относится дисциплина, название дисциплины

для направления подготовки (специальности) 04.04.01 Химия  
код и наименование направления подготовки (специальности)

Физическая и коллоидная химия  
наименование профиля /специализаций/образовательной программы

Квалификация выпускника, уровень подготовки магистр  
(указывается квалификация (степень) выпускника в соответствии с ФГОС ВО)

Форма обучения: очная

Кафедра - разработчик: Химия  
название кафедры - разработчика рабочей программы

Составитель – Новиков Андрей Игоревич, м.н.с.

МУ к СР рассмотрены и одобрены на заседании кафедры-разработчика

Химии

название кафедры

24.06.2019 протокол № 12.

## ОБЩИЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

### Цель изучения дисциплины:

подготовка магистров в соответствии с квалификационной характеристикой магистра и учебным планом направления подготовки 04.04.01 «Химия»

### Задачи дисциплины:

дать необходимые теоретические знания, практические умения и навыки по методам электронной спектроскопии, позволяющие успешно использовать их в профессиональной деятельности.

### В результате изучения дисциплины магистр должен:

#### *Знать:*

- волновые характеристики излучения;
- основные физико-химические методы исследования химического состава веществ;
- возможности современного спектрального анализа;
- теоретические основы электронной спектроскопии;
- основы люминесценции, флуоресценции и фосфоресценции.
- основы оже-спектроскопии,
- рентгеноспектральный микроанализ

#### *Уметь:*

- применять методы электронной спектроскопии для качественного и количественного анализа веществ;

*Владеть:* навыками спектральных методов анализа и идентификации веществ.

### Содержание разделов дисциплины:

Взаимодействие излучения с веществом. Теоретические основы спектроскопии. УФ-спектроскопия. Оже-спектроскопия. Рентгеноспектральный микроанализ. Люминесцентная спектроскопия.

### Реализуемые компетенции

ПК-2-н, ПК-3-н

### Формы промежуточной аттестации

Семестр 2 - зачет

### Планируемые результаты обучения

№ п/п	Код и содержание компетенции	Степень реализации компетенции	Этапы формирования компетенции (Индикаторы сформированности компетенций)
1.	ПК-2-н. Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Компетенция реализуется полностью	<b>ПК-2-н-1.</b> Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных <b>ПК-2-н-2.</b> Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии) <b>Знать:</b> – теоретические основы и методики методов электронной спектроскопии для решения вопросов, связанных с практической деятельностью. <b>Уметь:</b> – проводить поиск информации в патентно-информационных базах данных, анализировать и обобщать результаты патентного поиска о методах и методиках электронной спектроскопии.

			<p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– основными приемами поиска методик для анализа методами электронной спектроскопии; навыками планирования исследований и обработки экспериментальных данных.</li> </ul>
2.	<p>ПК-3-н. Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>Компетенция реализуется частично в части «Способен на основе критического анализа результатов НИР оценивать перспективы их практического применения в выбранной области химии» - электронной спектроскопии, физической и коллоидной химии</p>	<p><b>ПК-3-н-1.</b> Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными</p> <p><b>ПК-3-н-2.</b> Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов</p> <p><b>Знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– сущность методов электронной спектроскопии, и возможности их применения в выбранной области профессиональной деятельности</li> </ul> <p><b>Уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– систематизировать информацию, полученную в ходе выполнения анализов, НИР</li> <li>– сопоставлять полученные результаты с литературными данными</li> <li>– проводить оценку достоверности полученных результатов</li> </ul> <p><b>Владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– навыками определения возможных направлений продолжения работ, связанных с количественным определением химических элементов методами электронной спектроскопии</li> <li>– навыками планирования экспериментальных работ</li> </ul>

**ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН**  
**Самостоятельная работа**

Содержание тем дисциплины	Кол-во часов Очная
<p><i>Взаимодействие излучения с веществом.</i> Волновые характеристики излучения. Принципы получения информации при исследовании взаимодействия излучения с молекулами, прямая и обратная задачи спектроскопии, роль квантово-механической теории. Корпускулярные свойства излучения. Фотоэффект, формула Планка, энергия кванта, связь с длиной волны потока квантов. Волновые свойства микрочастиц. Корпускулярно-волновой дуализм, импульс и длина волны, соотношение Де-Бройля.</p>	10
<p><i>Молекулярная электронная спектроскопия. УФ-спектроскопия.</i> Правила отбора, влияние заселенности уровней. Уравнение Шредингера для водородоподобных атомов, квантование энергии, волновые функции, квантовые числа, принцип Паули. Соотношения между вращательным, колебательным и электронным движением, приближение Борна-Оппенгеймера, принцип Франка-Кондона. Шкала электромагнитных волн и различные области спектроскопии.</p>	10
<p><i>Теоретические основы спектроскопии.</i> Классификация электронных переходов. Дипольный момент, энергия диполя в электрическом поле. Основные правила отбора для электронных переходов. Роль пространственного перекрытия волновых функций, запреты по симметрии и по спину.</p>	10
<p><i>Оже-спектроскопия. Рентгеноспектральный микроанализ.</i></p>	12
<p><i>Люминесцентная спектроскопия.</i> Электронно-колебательные уровни и переходы между ними. Схема Яблонского, триплетные и синглетные возбужденные состояния, интеркомбинационные переходы между ними, диссипация энергии, колебательная релаксация. Времена жизни. Люминесценция, флуоресценция и фосфоресценция. Соотношение между поглощением и флуоресценцией молекул, закон Стокса, закон Вавилова, зеркальная симметрия спектров поглощения и флуоресценции. Интенсивность электронно-колебательных переходов (принцип Франка-Кондона). Кинетика флуоресценции и фосфоресценции, время жизни, естественное и действительное. Квантовые выходы. Тушение флуоресценции, формула Штерна-Фольмера. Влияние растворителя и других факторов на спектры поглощения и флуоресценции. Принцип измерения люминесценции, простейшая установка. Требования к источнику света, светофильтрам, кюветам, растворителю. Определение концентрации вещества по флуоресценции, концентрационное тушение, условия измерений. Фосфоресценция молекул, триплет-триплетное поглощение, замедленная флуоресценция.</p>	12
<b>Итого:</b>	<b>54</b>

## СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

№ п/п	Библиографическое описание (название литературного источника)	Наличие		
		Электронно-библиотечная система (ЭБС)	Библиотека МГТУ (печатное издание)	Количество экземпляров печатного издания
1.	Берестова Г.И., Коновалова И.Н., Долгопятова Н.В., Путинцев Н.М. Спектроскопические методы анализа (молекулярная спектроскопия). - Мурманск: Изд-во МГТУ, – 2014. - 192 с.	-	+	100
2.	Бёккер, Ю. Спектроскопия : учебник / Ю. Бёккер. — М. : Техносфера, 2009. — 528 с. — ISBN 978-5-94836-220-5. Режим доступа: <a href="http://www.iprbookshop.ru/12735.html">http://www.iprbookshop.ru/12735.html</a>	+	-	-
3.	Филимонова, Н. И. Методы электронной спектроскопии : учебное пособие / Н. И. Филимонова, А. А. Величко, Н. Е. Фадеева. — Новосибирск : Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, 2016. — 68 с. — ISBN 2227-8397. Режим доступа: <a href="http://www.iprbookshop.ru/69546.html">http://www.iprbookshop.ru/69546.html</a>	+	-	-
4.	Гржегоржевский, К. В. Основы молекулярной спектроскопии. Спектры оптического поглощения и люминесценции, применение в изучении полиоксометаллатных нанокластеров : учебное пособие / К. В. Гржегоржевский, А. А. Остроушко. — Екатеринбург : Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2015. — 212 с. — ISBN 978-5-7996-1652-6. Режим доступа: <a href="http://www.iprbookshop.ru/66564.html">http://www.iprbookshop.ru/66564.html</a>	+	-	-
5.	Зайцев, Б. Е. Применение ИК-спектроскопии в химии : учебное пособие / Б. Е. Зайцев, О. В. Ковальчукова, С. Б. Страшнова. — М. : Российский университет дружбы народов, 2008. — 152 с. — ISBN 978-5-209-03292-2. Режим доступа: <a href="http://www.iprbookshop.ru/11418.html">http://www.iprbookshop.ru/11418.html</a>	+	-	-
6.	Третьяк, Л. Н. Основы теории и практики обработки экспериментальных данных : учебное пособие / Л. Н. Третьяк, А. Л. Воробьев. — Оренбург : Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2015. — 216 с. — ISBN 978-5-7410-1282-6. (дата обращения: 26.10.2019). — Режим доступа: <a href="http://www.iprbookshop.ru/61387.html">http://www.iprbookshop.ru/61387.html</a>	+	-	-
7.	Спектральные методы анализа : учебное пособие / Е. В. Пашкова, Е. В. Волосова, А. Н. Шипуля [и др.]. — Ставрополь : Ставропольский государственный аграрный университет, 2017. — 56 с. — ISBN 2227-8397. Режим доступа: <a href="http://www.iprbookshop.ru/76055.html">http://www.iprbookshop.ru/76055.html</a>	+	-	-
8.	Сизова, Л. С. Аналитическая химия. Оптические методы анализа : учебное пособие / Л. С. Сизова. — Кемерово : Кемеровский технологический	+	-	-

	институт пищевой промышленности, 2006. — 179 с. — ISBN 5-89289-384-7. Режим доступа: <a href="http://www.iprbookshop.ru/14353.html">http://www.iprbookshop.ru/14353.html</a>			
--	--	--	--	--

## Перечень ресурсов информационно - телекоммуникационной сети «Интернет»

1. <http://chemexpress.fatal.ru>
2. <http://www.xumuk.ru>
3. <http://www.chemport.ru>

## МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

### Порядок и методические указания по изучению темы:

#### При изучении темы необходимо:

- Изучить материалы учебников (учебных пособий)
- Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.
- Решить задачи для самоконтроля

Перед решением задач необходимо внимательно изучить теоретический материал, проработать конспект лекции, разобрать примеры решения задач. Решение задач рекомендуется начинать с наиболее простых. Затем переходить к решению более сложных вариативных задач. При решении задач рекомендуется записать краткое условие задачи, уравнения реакций, исходные формулы для расчёта. Не рекомендуется использовать готовые конечные формулы, которые выводятся в примерах решения задач. С исходных формул необходимо вывести расчётные, а затем подставить в них численные значения. Таким образом, запись в тетради должна содержать формулы и все вычисления с указанием единиц измерения. Рекомендуется при записи величин чётко указывать к каким веществам, растворам, смесям и т. п. они относятся. При вычислениях необходимо обращать внимание на их точность (использование нужного числа значащих цифр) и соблюдение правил округления.

#### Вопросы для самоконтроля:

1. Какие задачи решает молекулярная спектроскопия?
2. Какова природа электромагнитного излучения и его основные характеристики?
3. Типы взаимодействия излучения с веществом.
4. Каковы свойства индуцированных (вынужденных) переходов?
5. Каково соотношение между вероятностями переходов при тепловом равновесии?
6. Какая орбиталь называется разрыхляющей, связывающей?
7. Приведите схему энергетических уровней двухатомной молекулы
8. Перечислите основные элементы установок для спектроскопических исследований
9. Какие источники света используют в спектрофотометрах?
10. Назовите основные характеристики монохроматоров
11. Перечислите типы поляризации света
12. Виды электронных переходов
13. Принцип Франка – Кондона
14. Какой закон лежит в основе количественного определения в фотометрии?
15. Назовите основные правила отбора в спектроскопии
16. Назовите преимущества и области применения метода многократного нарушенного полного внутреннего отражения
17. Качественный и количественный анализ в ИК-спектроскопии
18. Качественный и количественный анализ в УФ-спектроскопии
19. Приведите классификацию видов люминесценции

20. В чем состоит различие фосфоресценции и флуоресценции?
21. Спонтанная, вынужденная люминесценция
22. Рекомбинационная люминесценция
23. Приведите схему энергетических уровней синглетных и триплетных состояний молекул и переходов между ними
24. Выбор условий проведения люминесцентных измерений
25. Методы измерения выхода люминесценции
26. Методы изучения кинетики люминесценции
27. Каковы спектральные закономерности люминесценции

**Задачи для самоконтроля представлены в методических указаниях к практическим работам.**