

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«ТЮМЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»



УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор

А.В. Толстиков

29.08.2022 г.

НОВЫЕ ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Рабочая программа

для обучающихся по научной специальности 1.4.2. Аналитическая химия

форма обучения (очная)

Ларина Н.С. Новые инструментальные методы в аналитической химии. Рабочая программа для обучающихся по научной специальности 1.4.2 Аналитическая химия, форма обучения (очная). Тюмень, 2022.

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями ФГТ к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, утверждены приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 20 октября 2021 г., № 951.

Рабочая программа дисциплины Новые инструментальные методы в аналитической химии опубликована на сайте ТюмГУ: [электронный ресурс] / Режим доступа: <https://www.utmn.ru/sveden/education/#>.

1. Цели и задачи освоения дисциплины (модуля)

Цель дисциплины: освоение современных инструментальных методов исследования, применяющихся в химии и необходимых для эффективного освоения основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) по направлению 04.05.01 Химические науки (Аналитическая химия) и подготовки кандидатской диссертации.

Задачи дисциплины: ознакомление с теоретическими основами инструментальных методов (структурные модели молекул и твердых тел, взаимодействие вещества с излучением); практическое применение инструментальных методов в современной аналитической химии; использование химического анализа в экологических исследованиях.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения данной дисциплины (модуля)

ПК-5 - способность использовать современную научную аппаратуру и методы, используемые при выполнении научных исследований в области аналитической химии (элементный анализ, газовая и жидкостная хроматография, атомная и молекулярная спектроскопия, масс-спектрометрия, электрохимические методы, методы математического моделирования и статистической обработки данных)

В результате освоения ОП выпускник должен обладать следующими компетенциями:

Знать: теоретические основы спектральных, дифракционных, хроматографических и электрохимических методов исследования; структурные модели молекул.

Уметь: собирать и анализировать научную, технологическую и статистическую информацию; планировать экспериментальные научные исследования в области аналитической химии, обрабатывать экспериментальные данные, подготавливать к публикации статьи и тезисы докладов.

Владеть: современными методами экспериментальных исследований в области аналитической химии, методами математической статистики и математического моделирования, информационными технологиями, в т.ч. методами работы с компьютером и электронными базами данных.

3. Структура и объем дисциплины

Таблица 1

Вид учебной работы	Всего часов (академические часы)	Часов в семестре (академические часы)
		4
Общий объем зач. ед. час	3	3
	108	108
Из них:		
Часы аудиторной работы (всего):	22	22
Лекции	12	12
Практические занятия	10	10
Лабораторные / практические занятия по подгруппам	0	0
Часы внеаудиторной работы, включая самостоятельную работу обучающегося	50	50
Вид промежуточной аттестации (диф. зачет, кандидатский экзамен, экзамен)	36	Дифференцированный зачет 36

4. Система оценивания

4.1. Критерии оценивания работы обучающихся:

1) Качество освоения учебного материала (умение аспиранта использовать теоретические знания при выполнении практических задач);

2) Проработанность всех аспектов задания, оформление материала в соответствии с требованиями, соблюдение установленных сроков представления работы на проверку;

3) Степень самостоятельности, творческой активности, инициативности аспирантов, наличие элементов новизны в процессе выполнения заданий.

Обучающиеся, не набравшие 61 балла в течение семестра, или не согласные с оценкой, полученной по итогам текущего контроля в семестре, проходят промежуточную аттестацию в форме дифференцированного зачета по билетам. При проведении промежуточной аттестации результаты, полученные обучающимися в семестре, переводятся в формат традиционной оценки в соответствии со шкалой перевода баллов:

– 60 баллов и менее – «неудовлетворительно»;

– от 61 до 75 баллов – «удовлетворительно»;

– от 76 до 90 баллов – «хорошо»;

– от 91 до 100 баллов – «отлично».

5. Содержание дисциплины

5.1. Тематический план дисциплины

Таблица 2

№ п/п	Наименование тем и/или разделов	Объем дисциплины (модуля), час.				
		Всего	Виды аудиторной работы (академические часы)			Иные виды контакт ной работы
			Лекции и	Практич еские занятия	Лабораторные/ практические занятия по подгруппам	
1	2	3	4	5	6	7
	Часов в 4 семестре	58	12	10	0	36
	Новые инструментальные методы в аналитической химии	58	12	10	0	36
1.	Теоретические основы инструментальных методов	4	4	0	0	0
2.	Спектральные и дифракционные методы	4	4	0	0	0
3	Сепарационные и электрохимические методы анализа	4	4	0	0	0
4	Теоретические основы инструментальных методов	4	0	4	0	0
5	Спектральные и дифракционные методы	4	0	4	0	0
6	Сепарационные и электрохимические методы анализа	2	0	2	0	0
7	Дифференцированный зачет	36	0	0	0	36
	Итого (часов)	58	12	10	0	36

5.2. Содержание дисциплины (модуля) по темам

1. Теоретические основы инструментальных методов

Основы учения о строении молекул. Стационарные состояния: электронные, колебательные, вращательные, ядерные спиновые. Квантовые переходы между стационарными состояниями, вероятности и правила отбора. Типы молекулярных спектров: электронные, колебательно-вращательные, ЯМР, фотоэлектронные. Методы регистрации и обработки спектров. Качественный, количественный и структурный спектральный анализ. Дифракция электромагнитных волн и электронных пучков на точечных объектах и кристаллах. Адсорбционные характеристики органических молекул. Хроматограмма и ее характеристики, методы регистрации и обработки. Время удерживания и индексы удерживания, их связь со строением молекул сорбата и сорбента. Основные методики хроматографического анализа. Качественный, количественный и структурный хроматографический анализ.

Строение растворов электролитов. Электрохимические процессы и их механизмы.

Стационарные состояния атомов и молекул: электронные, колебательные, вращательные, ядерные спиновые. Квантовые переходы между стационарными состояниями, вероятности и правила отбора. Типы молекулярных спектров: электронные, колебательно-вращательные, ЯМР, фотоэлектронные. Методы регистрации и обработки спектров. Качественный, количественный и структурный спектральный анализ.

2. Спектральные и дифракционные методы

Идентификация химических соединений спектральными методами: использование УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии. Рентгеновская спектроскопия: метод РФЭС, метод протяженной тонкой структуры рентгеновского поглощения (ПТСРП, EXAFS). Связь спектра с природой исследуемого вещества. Возможности и ограничения.

Количественное определение химических элементов и соединений спектральными методами. Чувствительность, селективность и точность анализа. Специфика методики анализа в экологическом мониторинге. Структурный спектральный анализ. Определение структурных фрагментов молекулы (радикалы, функциональные группы, тип скелета, кратные связи и т.д.).

Современные дифрактометрические методы: рентгеновская дифрактометрия, дифракция низкоэнергетических (медленных) электронов (LEED), рассеяние ионных пучков низкой энергии (LEIS), рассеяние рентгеновских лучей при малых углах (XANES), просвечивающая / сканирующая электронная микроскопия.

Сканирующая туннельная микроскопия.

Использование спектральных методов для исследования структуры молекул и твердых тел, катализаторов, механизмов химических реакций.

3. Сепарационные и электрохимические методы анализа

Идентификация органических соединений хроматографическими методами: использование ГЖХ- и ВЭЖХ-методов. Методы повышения качества хроматограммы, подбор детекторов, колонок, неподвижных фаз, элюентов, температурных режимов. Капиллярный электрофорез. Возможности и ограничения сепарационных методов.

Количественное определение ионов и органических соединений сепарационными методами. Чувствительность, селективность и точность анализа. Специфика методики анализа в экологическом мониторинге.

Структурный хроматографический анализ. Индексы удерживания, их связь со строением молекул. Определение структурных фрагментов молекулы (радикалы, функциональные группы, тип скелета, кратные связи и т.д.).

Новое в электрохимических методах анализа: потенциометрии, вольтамперометрии, кулонометрии, электрогравиметрии.

6. Учебно-методическое обеспечение и планирование самостоятельной работы обучающихся

Таблица 3

№ темы	Темы	Формы СРС, включая требования к подготовке к занятиям
1.	Теоретические основы инструментальных методов	Чтение обязательной и дополнительной литературы. Проработка лекций.
2.	Спектральные и дифракционные методы	Чтение обязательной и дополнительной литературы. Проработка лекций.
3.	Сепарационные и электрохимические методы анализа	Чтение обязательной и дополнительной литературы. Проработка лекций.
4.	Дифференцированный зачет	Самостоятельное изучение заданного материала

Формы контроля самостоятельной работы:

- чтение обязательной и дополнительной литературы – проверка и анализ конспектов лекций и учебной литературы, устные опросы и контрольные задания, доклады в виде презентаций на практических занятиях;
- подготовка презентаций и докладов – заслушивание и обсуждение устных докладов, сообщений, выступлений.

7. Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю)

7.1. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

При проведении промежуточной аттестации результаты, полученные обучающимся в семестре, переводятся в формат традиционной оценки в соответствии со шкалой перевода баллов:

- 60 баллов и менее – «неудовлетворительно»;
- от 61 до 75 баллов – «удовлетворительно»;
- от 76 до 90 баллов – «хорошо»;
- от 91 до 100 баллов – «отлично».

Обучающиеся, не набравшие 61 балла в течение семестра, или не согласные с оценкой, полученной по итогам текущего контроля в семестре, проходят промежуточную аттестацию в форме дифференцированного зачета по билетам. Собеседование имеет целью выявление уровня освоения дисциплины, характеризующего знания обучающегося в соответствии с определенными компетенциями.

Вопросы к дифференцированному зачету

1. Стационарные состояния атомов и молекул: электронные, колебательные, вращательные, ядерные спиновые. Квантовые переходы между стационарными состояниями, вероятности и правила отбора.
2. Типы атомных и молекулярных спектров: электронные, колебательно-вращательные, ЯМР, фотоэлектронные. Методы регистрации и обработки спектров.
3. Качественный, количественный и структурный спектральный анализ.
4. Дифракция электромагнитных волн и электронных пучков на точечных объектах и кристаллах.
5. Адсорбционные характеристики органических молекул. Хроматограмма и ее характеристики, методы регистрации и обработки. Время удерживания и индексы удерживания, их связь со строением молекул сорбата и сорбента.

6. Основные методики хроматографического анализа. Качественный, количественный и структурный хроматографический анализ.
7. Строение растворов электролитов. Электрохимические процессы и их механизмы.
8. Идентификация химических соединений спектральными методами: использование УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии.
9. Рентгеновская спектроскопия: метод РФЭС, метод протяженной тонкой структуры рентгеновского поглощения (ПТСРП, EXAFS).
10. Связь спектра с природой исследуемого вещества. Возможности и ограничения.
11. Количественное определение химических элементов и соединений спектральными методами. Чувствительность, селективность и точность анализа.
12. Структурный спектральный анализ. Определение структурных фрагментов молекулы (радикалы, функциональные группы, тип скелета, кратные связи и т.д.).
13. Современные дифрактометрические методы: рентгеновская дифрактометрия, дифракция низкоэнергетических (медленных) электронов (LEED), рассеяние ионных пучков низкой энергии (LEIS), рассеяние рентгеновских лучей при малых углах (XANES), просвечивающая / сканирующая электронная микроскопия.
14. Сканирующая туннельная микроскопия.
15. Использование спектральных методов для исследования структуры молекул и твердых тел, катализаторов, механизмов химических реакций.
16. Идентификация органических соединений хроматографическими методами: использование ГЖХ- и ВЭЖХ-методов.
17. Методы повышения качества хроматограммы, подбор детекторов, колонок, неподвижных фаз, элюентов, температурных режимов. Капиллярный электрофорез. Возможности и ограничения сепарационных методов.
18. Количественное определение ионов и органических соединений сепарационными методами. Чувствительность, селективность и точность анализа.
19. Структурный хроматографический анализ. Индексы удерживания, их связь со строением молекул. Определение структурных фрагментов молекулы (радикалы, функциональные группы, тип скелета, кратные связи и т.д.).
20. Новое в электрохимических методах анализа: потенциометрии, вольтамперометрии, кулонометрии, электрогравиметрии.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

8.1. Основная литература:

1. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе : издание второе, переработанное и дополненное. учебное пособие / Н. Г. Ярышев, Ю. Н. Медведев, М. И. Токарев [и др.]. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе, 2024-10-01. Москва : Прометей, 2015. 196 с. ISBN 978-5-9906134-6-1.2.
2. Будников, Г. К. Методы и достижения современной аналитической химии [Электронный ресурс] / Будников Г. К., Вершинин В. И., Евтюгин Г. А., Карцова Л. А., Лебедев А. Т., Мазур Д. М., Майстренко В. Н., Проскурнин М. А., Пупышев А. А., Шеховцова Т. Н., Шпигун О. А., Яшкин С. Н. 2-е изд., стер. Санкт-Петербург : Лань, 2021. 588 с. ISBN 978-5-8114-7962-7.

8.2. Дополнительная литература:

1. Аналитическая химия: химические методы анализа : учебник / Е. Г. Власова, А. Ф. Жуков, И. Ф. Колосова [и др.] ; под редакцией О. М. Петрухина, Л. Б. Кузнецовой. — 2-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 467 с. — ISBN 978-5-93208-502-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL:

<https://e.lanbook.com/book/166725> (дата обращения: 05.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. Атомно-абсорбционный анализ : учебное пособие / А. А. Ганеев, С. Е. Шолупов, А. А. Пупышев, А. А. Большаков. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 304 с. — ISBN 978-5-8114-1117-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/4028> (дата обращения: 5.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. Молекулярно-абсорбционный метод анализа органических веществ : учебно-методическое пособие / Е. В. Черданцева, И. В. Гейде, В. Г. Китаева, В. М. Зыскин ; под редакцией И. В. Гейде, научный редактор Н. П. Бельская. — Екатеринбург : УрФУ, 2015. — 96 с. — ISBN 978-5-7996-1567-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/98423> (дата обращения: 5.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

4. Сычев, С. Н. Высокоэффективная жидкостная хроматография: аналитика, физическая химия, распознавание многокомпонентных систем : учебное пособие / С. Н. Сычев, В. А. Гаврилина. — Санкт-Петербург : Лань, 2013. — 256 с. — ISBN 978-5-8114-1377-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/5108> (дата обращения: 5.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

5. Лефедова, О. В. Молекулярная спектроскопия : учебно-методическое пособие / О. В. Лефедова, С. А. Шлыков. — Иваново : ИГХТУ, 2016. — 95 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/96110> (дата обращения: 5.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

5. Умарова, Н. Н. Введение в хеометрику : учебно-методическое пособие / Н. Н. Умарова, Н. И. Валеева. Введение в хеометрику, 2025-04-18. Казань : Издательство КНИТУ, 2020. 116 с. ISBN 978-5-7882-2843-3.

8.3. Интернет-ресурсы:

<http://e-library.ru>

<http://e.lanbook.com>

<http://chemistry-chemists.com/Uchebniki.html>

<http://chemport.ru/>

<http://www.anchem.ru>

<http://knigozilla.ru/9266-analiticheskaja-khimija..html>

<http://www.nofollow.ru/detail106408.htm>

http://techbiblio.ru/index.php?option=com_content&task=blogcategory&id=149&Itemid

=310

<http://nehudlit.ru/books/detail7514.html>

http://web-local.rudn.ru/web-local/disc/disc_4328/

<http://archive.neicon.ru/xmlui/> Архив научных журналов

Базы данных, доступные в рамках национальной подписки

<https://rd.springer.com/>

<https://onlinelibrary.wiley.com/>

<https://www.jstor.org/>

<https://www.cambridge.org/core>

Российские базы данных:

<https://grebennikon.ru/>

<https://dlib.eastview.com/browse>

<https://eduvideo.online/>

<https://www.iprbookshop.ru/>

<https://urait.ru/>

9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю):

- Лицензионное ПО:
- Платформа для электронного обучения Microsoft Teams:
- **Свободно распространяемое ПО, в том числе отечественного производства:**
Использование типовых компьютерных программ (Excel, Word, PowerPoint) для решения вычислительных задач, составления отчетов и презентаций.

10. Технические средства и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Мультимедийная учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа оснащена следующими техническими средствами обучения и оборудованием: учебная мебель, доска аудиторная, мультимедийное проекционное и акустическое оборудование, персональный компьютер.

Мультимедийная учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа оснащена следующими техническими средствами обучения и оборудованием: учебная мебель, доска аудиторная, мультимедийное проекционное и акустическое оборудование, персональный компьютер.

Для самостоятельной работы аспирантов необходим доступ в компьютерный класс, имеющий выход в Интернет.

11. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям лиц с ограниченными возможностями

В случае необходимости, обучающимся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (по заявлению обучающегося) могут предлагаться одни из следующих вариантов восприятия информации с учетом их индивидуальных психофизических особенностей, в том числе с применением электронного обучения и дистанционных технологий:

- для лиц с нарушениями зрения: в печатной форме увеличенным шрифтом; в форме электронного документа; в форме аудиофайла (перевод учебных материалов в аудиоформат); индивидуальные задания и консультации.
- для лиц с нарушениями слуха: в печатной форме; в форме электронного документа; индивидуальные задания и консультации.
- для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата: в печатной форме; в форме электронного документа; в форме аудиофайла; индивидуальные задания и консультации.

12. Методические рекомендации обучающимся по выполнению самостоятельной работы

Регулярное чтение выпусков научных обзорных журналов по аналитической и экологической химии (Аналитическая химия, Chemosphere, Environmental Science & Technology, Trends in Environmental Analytical Chemistry, Аналитика и Контроль, Экология и промышленность России, Вестник Томского политехнического университета, Geo Assets Engineering, Теоретическая и прикладная экология, Вестник Томского университета, Известия ВУЗов. Химия и химическая технология, Известия РАН. Серия химическая, Экологическая химия и др.).

Самостоятельное планирование и исследований в области исследования объектов окружающей среды с помощью современных инструментальных методов и подходов.

Качество освоения учебного материала оценивается по умению аспиранта использовать теоретические знания при выполнении практических задач, по степени проработанности всех аспектов задания, оформлению материала, соблюдению установленных сроков представления работы на проверку, степени самостоятельности,

творческой активности, наличие элементов новизны и оригинальности подхода при выполнении заданий.