

УдмФИЦ УрО РАН

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«УДМУРТСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
Уральского отделения Российской академии наук»**

ОДОБРЕНО

Объединенным ученым советом
УдмФИЦ УрО РАН

Протокол № 3 от «15» апреля 2022г.

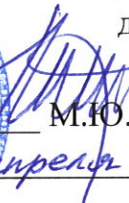
Главный ученый секретарь, к.х.н.

 О.Ю. Гончаров

УТВЕРЖДАЮ

Директор УдмФИЦ УрО РАН,
д.ф.-м.н.



 М.Ю. Альес

«15» апреля 2022г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Спектроскопические методы исследования веществ и материалов

2022

Ижевск

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности

1.4.4. Физическая химия
(шифр и наименование специальности)

Разработчик:

Ведущий научный сотрудник, д. х. н.


(подпись) Чаусов Ф. Ф.

Согласовано:

Заместитель директора
по естественно-научному направлению


(подпись) А.И. Коршунов

Зав. аспирантурой, к.ф.-м.н.


(подпись) М.Ю. Лебедева

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Спектроскопические методы исследования веществ и материалов» является формирование и развитие у аспирантов компетенций в области общих знаний спектроскопии, ориентированных преимущественно на практическое применение в области материаловедения, создания новых конструкционных и функциональных материалов, разработки и внедрения технологий их производства и применения; а также специфических особенностей спектроскопических методов исследования, предоставляемой этими методами информации о строении и свойствах веществ и материалов.

В процессе достижения цели ставятся следующие **задачи**:

- изучить избранные главы междисциплинарной области знаний «Спектроскопические методы исследования веществ и материалов» и получить систематические знания о видах излучения, используемого в спектроскопии, видах аналитических сигналов и закономерностях взаимодействия излучения с веществом;
- получить знания о диспергирующих устройствах и детекторах, используемых в спектроскопии, оптических схемах и конструкциях спектральных приборов;
- изучить историю развития спектроскопии, вклад российских учёных в создание современных спектроскопических методов и современное состояние спектроскопии как фундаментальной области знаний и её приложениях в промышленности;
- изучить основные виды и методы спектроскопии, конструкции и принцип действия используемых приборов, характер получаемых спектров, предоставляемую ими информацию о составе и строении веществ и материалов.

2. МЕСТО ПРОГРАММЫ В СТРУКТУРЕ ПРОГРАММЫ АСПИРАНТУРЫ

Учебная дисциплина «Спектроскопические методы исследования веществ и материалов» входит в образовательный компонент подготовки аспирантов по научной специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Для изучения данной дисциплины необходимы знания по физике и химии в объеме программы высшего образования.

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении данного курса, необходимы при подготовке к сдаче кандидатского экзамена и написании диссертационной работы.

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

По окончании изучения дисциплины «Спектроскопические методы исследования веществ и материалов» аспиранты должны:

Знать:

- основные принципы спектроскопии, используемые в спектроскопии виды излучений и аналитических сигналов, используемые в спектроскопии физические величины, их взаимные соотношения и единицы измерения, классификацию спектроскопических методов и приборов, методы представления и обработки спектроскопической информации;
- основные принципы рентгеновской, электронной и гамма-спектроскопии, структуру получаемых спектров, предоставляемую ими информацию, методы интерпретации и практическое применение для анализа веществ и материалов;
- конструкцию и принцип действия основных используемых в спектроскопии источников излучения, монохроматоров, диспергирующих элементов и спектральных приборов в целом.

Уметь:

- анализировать современную научную информацию, современные спектроскопические базы данных, и формировать литературный обзор по теме своих исследований;
- пользоваться современными спектроскопическими приборами и методами для проведения исследований веществ и материалов; готовить образцы веществ и материалов в

различных агрегатных состояниях, с различной структурой и свойствами.

- проводить исследования веществ и материалов современными спектроскопическими методами, правильно обрабатывать и интерпретировать результаты исследований, правильно оценивать погрешности спектроскопических данных, правильно представлять полученные спектроскопические данные и аргументировать свои выводы.

Владеть: современными методами спектроскопических исследований веществ и материалов, способами интерпретации спектров различных видов как в отдельности, так и совместно, применять полученные результаты в своей научной работе.

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Спектроскопические методы исследования веществ и материалов» составляет 2 зачетные единицы (76 академических часов).

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения программы аспирантуры

Вид учебной работы		Всего акад. часов	Курс			
			1	2	3	4
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>						
В том числе						
Лекции (ЛК)		22			22	
Практические/семинарские занятия (ПЗ)		0			0	
<i>Самостоятельная работа обучающихся (СР), ак.ч.</i>		50			50	
<i>Подготовка реферата</i>		50			50	
<i>Контроль (форма контроля)</i>						
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72			72	
	зач.ед.	2			2	

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Разделы дисциплины и виды занятий

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
Раздел 1. Основы спектроскопических методов	1. Общее представление о спектроскопии. Подходы к классификации спектроскопических методов исследования. Используемые в спектроскопии виды излучения и аналитические сигналы. 2. Часто используемые в спектроскопии физические величины, их взаимные соотношения и принятые единицы измерения. Цифровые и графические способы представления спектроскопической информации. Погрешности спектроскопических измерений.	ЛК
Раздел 2. Рентгеновская, электронная и гамма- спектроскопия	3. Виды излучения, взаимодействующие с электронной подсистемой вещества. Рентгеновское излучение, его источники, их конструкции и особенности. Устройство рентгеновской трубки и синхротрона. Особенности схем высоковольтного питания рентгеновских трубок. Фильтры и монохроматоры рентгеновского излучения. Демонстрация рентгеновских трубок различных типов и их деталей. 4. Рентгеновская спектроскопия испускания. Способы возбуждения рентгеновского излучения. Механизм	ЛК

	формирования рентгеновского излучения и его спектр. Тонкая структура спектра. Рентгеновские обозначения энергетических уровней и их соответствие принятым в химии обозначениям. Рентгеновская флуоресцентная спектроскопия. Волновые и энергетические анализаторы рентгеновского спектра. Рентгеновский флуоресцентный микроанализ в электронной микроскопии. Примеры практического применения рентгеновской спектроскопии испускания. Демонстрация приборов для рентгеновского флуоресцентного микроанализа. 5. Рентгеновская спектроскопия поглощения. Принцип Фраунгофера в рентгеновской спектроскопии. Структура K-, L-, M- краёв поглощения. XANES-спектроскопия, предоставляемая информация и интерпретация спектров. EXAFS-спектроскопия, математические основы интерпретации и информация о строении вещества. 6. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС). Принцип формирования химического сдвига. Многоэлектронное возбуждение. Сателлитная структура спектра. Происхождение shake-up и shake-down-сателлитов. Приборы, используемые для получения спектров РФЭС. Высоковакуумная техника в РФЭС. Типы энергоанализаторов и их конструкция. Типы детекторов фотоэлектронов и их конструкция. Аналитическая глубина метода. Информация, предоставляемая спектрами РФЭС. Приёмы подготовки образцов для РФЭС. Демонстрация приборов для РФЭС. Примеры интерпретации и практического применения спектров РФЭС. 7. Оже-спектроскопия. Сущность эффекта Оже. Обозначения Оже-линий спектра. Отличия Оже-линий спектра от линий РФЭС-спектра. Аналитическая глубина метода. Методы возбуждения эффекта Оже. Оже спектрометры с электронным возбуждением. Демонстрация Оже-спектрометра с электронным возбуждением. Демонстрация Оже-линий в РФЭС-спектрах. Информация, предоставляемая Оже-спектроскопией, и примеры её практического применения. 8. Мёссбауэровская спектроскопия. Эффект Мёссбауэра. Принцип действия и конструкция мёссбауэровских спектрометров. Мёссбауэровские ядра. Структура и интерпретация мёссбауэровских спектров. Демонстрация мёссбауэровского спектрометра.	
Раздел 3. Оптическая спектроскопия.	9. Оптический диапазон излучения и особенности его поддиапазонов. Взаимодействие оптического излучения с веществом. Материалы ИК-, видимой и УФ-оптики. Диспергирующие элементы оптического диапазона, их конструкция и принцип действия. Оптические схемы и конструкции оптических спектрометров. 10. УФ- и видимая спектроскопия. Анализируемые электронные переходы и их связь с электронной	ЛК

	структурой валентной зоны. Оптические схемы и конструкции УФ-/видимых спектрометров. Демонстрация УФ-/видимого спектрометра на базе монохроматора МДР-41. 11. Молекулярно-колебательная спектроскопия. Механическая модель молекулы. Силовая константа связи. Инфракрасная спектроскопия. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Мировой приоритет СССР в открытии комбинационного рассеяния. Оптические схемы и конструкции ИК- и КР-спектрометров. Принцип работы микроскопа с КР-спектроскопией. Демонстрация ИК-спектрометра с приставками с различными оптическими схемами. Правило альтернативного запрета колебательных мод. Примеры интерпретации ИК- и КР-спектров.	
Раздел 4. Радиочастотная спектроскопия.	12. Принципы радиочастотной спектроскопии. Ядерный магнитный резонанс. ЯМР-активные ядра. Расщепление сигналов ЯМР. Константа спин-спинового взаимодействия. Конструкции спектрометров ЯМР. Особенности подготовки образцов жидких и твёрдых веществ для спектроскопии ЯМР. Примеры интерпретации ЯМР-спектров. Представление о корреляционной спектроскопии. 13. ЭПР-спектроскопия. Мировой приоритет СССР в открытии ЭПР-спектроскопии. Конструкции спектрометров ЭПР. Информация, предоставляемая спектрами ЭПР, и примеры их интерпретации.	ЛК

6. ТЕМЫ РЕФЕРАТОВ

1. Исследование состава и структуры образцов веществ, материалов методом РФЭС-спектроскопии (по теме аспирантской работы, диссертации).
2. Исследование состава и структуры образцов веществ, материалов методом Оже-спектроскопии (по теме аспирантской работы, диссертации).
3. Исследование состава и структуры образцов веществ, материалов методом ИК-спектроскопии (по теме аспирантской работы, диссертации).

7. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Технология процесса обучения аспирантов включает в себя следующие образовательные мероприятия:

- аудиторные занятия (лекции);
- практическая работа аспирантов (в т.ч. с использованием системы дистанционного обучения);
- контрольные мероприятия в процессе обучения и по его окончанию: зачёт с оценкой на основании выполненной курсовой работы, который проводится в 5-ом семестре.

В процессе изучения дисциплины, как лектором, так и обучающимися используется метод проблемного изложения материала, самостоятельное чтение аспирантами учебной, учебно-методической и справочной литературы, анализ информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по актуальным проблемам спектроскопии.

Аудиторные занятия проводятся с использованием информационно-телекоммуникационных технологий: учебный материал представлен также в виде мультимедийных презентаций. Презентации позволяют четко структурировать материал занятия.

Самостоятельная работа аспирантов организована в соответствии с технологией проблемного обучения и предполагает следующие формы активности:

- поиск научной информации в открытых источниках с целью ее анализа и выявления ключевых особенностей исследуемых явлений;
- самостоятельная проработка учебно-проблемных задач, выполняемая с привлечением основной и дополнительной литературы, постановка которых отвечает целям освоения модуля;
- решение проблемных задач стимулируют познавательную деятельность и научно-исследовательскую активность аспирантов.

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Цель контроля - получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

1. Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляемая на протяжении семестра. Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, и развитие практических умений.

2. Аттестация

Завершает изучение дисциплины «Спектроскопические методы исследования веществ и материалов» зачёт с оценкой на основании выполненного реферата (курсовой работы), который проводится в 5-ом семестре.

3. Фонд оценочных средств для проведения текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

Критерии оценивания для зачета с оценкой.

Оценка выставляется по итогам написания реферата.

Оценка «отлично» - наличие глубоких исчерпывающих знаний (в объеме утвержденной программы дисциплины в соответствии с поставленными программой курса целями и задачами обучения); грамотное и логически стройное изложение материала, усвоение основной и знакомство с дополнительной литературой.

Оценка «хорошо» - наличие твердых и достаточно полных знаний (в объеме утвержденной программы дисциплины в соответствии с целями обучения), правильные действия по применению знаний, умений, владений на практике, четкое изложение материала, допускаются отдельные логические и стилистические погрешности, сдающий усвоил основную литературу, рекомендованную в программе дисциплины;

Оценка «удовлетворительно» - наличие недостаточно полных знаний (в объеме утвержденной программы), изложение материала с отдельными ошибками, правильные в целом действия по применению знаний на практике.

Оценка «неудовлетворительно» - тема реферата не раскрыта, наличие грубых ошибок, непонимание сущности излагаемого вопроса, неумение применять знания на практике.

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для проведения обучения имеется необходимая материально-техническая база, соответствующая действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам:

- помещения для проведения занятий, оборудованные комплектом мебели;
- комплект проекционного мультимедийного оборудования;
- компьютеры с доступом к сети Интернет;
- библиотека с информационными ресурсами на бумажных и электронных носителях;
- офисная оргтехника;
- лаборатории (К-225, К-109, К-08, К-309), оснащённые оборудованием для спектроскопических исследований веществ и материалов современными методами.

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Электронная спектроскопия. М.: Мир, К. Зигбан, К. Нордлинг, А. Фальман и др.; Пер. с англ. под ред. И.Б. Боровского. – 1971. – 493 с.
2. Мальцев А.А. Молекулярная спектроскопия (Теория, практические работы, задачи): Учеб. пос. для вузов. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1980. – 271 с.
3. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия – Киев: Наук. думка, Редкол.: В.В. Немошкаленко и др. 1977 – 184с.
4. Рентгеноспектральный метод изучения структуры аморфных тел: EXAFS-спектроскопия. Новосибирск: Наука. Д.И. Кочубей, Ю.А. Бабанов, К.И. Замараев и др. – 1988. – 305 с.
5. Анализ поверхности методами Оже- и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. – М.: Мир, – Под ред. Д. Бриггса, М.П. Сиха. Пер. с англ. под ред. В.И. Раховского, И.С. Реза. – 1987. – 598 с.

Дополнительная литература:

1. Альфа-, бета- и гамма-спектроскопия. Вып. 2. М.: Атомиздат, под ред. К. Зигбана; Пер.с англ. – 1969. – 259 с.
2. Стриганов А.Р., Одинцова Г.А. Таблицы спектральных линий атомов и ионов: Справочник. – М.: Энергоиздат, 1982. – 312 с.
3. Фридрихов С.А. Энергоанализаторы и монохроматоры для электронной спектроскопии – Л.: Изд-во ЛГУ, 1978. – 158 с.
4. Feynmann R.P. Quantum Electrodynamics. – New York, 1961. – 198 p.
5. Bax A. Two-dimensional Nuclear Magnetic Resonance in Liquids. – Dordrecht:Delft University Press, 1982. – 200 p.
6. Демтрёдер В. Лазерная спектроскопия: Основные принципы и техника эксперимента – М.: Наука, Пер. с англ. А.И. Маслова и Е.А. Юкова; под ред. И.И.Собельмана. 1985. – 607с.