

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 16.09.2022 15:36:57
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Спектрофотометрия

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

Перспективные материалы: синтез и анализ

Для студентов 3 курса очной формы обучения

Составитель: д.х.н., Алексеев В.Г. _____

Тверь, 2021

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины:

Целью освоения дисциплины является:

обучение теоретическим основам и практическому применению метода абсорбционной спектроскопии УФ-, видимой и ИК-области в исследовательских и аналитических целях.

Задачами освоения дисциплины являются:

освоение количественных законов светопоглощения, условий их выполнения и причин отклонения реальных систем от закономерностей, описывающих идеальные системы;

знакомство с принципами устройства спектрофотометров;

обучение навыкам работы со спектрофотометрами;

освоение некоторых распространенных методик спектрофотометрического определения элементов.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Спектрофотометрия» входит в Элективные дисциплины 4 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Призван детализировать знания о спектральных методах, полученных в ходе изучения общих дисциплин «Аналитическая химия» и «Физические методы исследования», а также подготовить студентов к изучению дисциплин «Фотометрия пламени» или «Атомно-абсорбционный и атомно-эмиссионный метод анализа» и прохождению преддипломной практики.

3. Объем дисциплины: 2 зачетные единицы, 72 академических часа, в том числе:

контактная аудиторная работа: лекции - 18 часов, лабораторные работы 18 - часов;

самостоятельная работа: 36 часов.

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР

химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР ПК-1.3 Готовит объекты исследования
ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных) ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:
зачет в 6-м семестре.

6. Язык преподавания русский.

II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего часов (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Лаб. работы	
Тема 1. Электромагнитное излучение и его характеристики	4	2	0	2
Тема 2. Взаимодействие с веществом электромагнитного излучения световых диапазонов (УФ, видимое, ИК). Спектр поглощения	4	2	0	2

Тема 3. Закон Бугера-Ламберта-Бера	4	2	0	2
Тема 4. Отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бера	4	2	0	2
Тема 5. Основные понятия УФ/вид спектрофотометрии	4	2	0	2
Тема 6. Спектрофотометры УФ/вид диапазона. Конструкция. Техника измерений.	4	2	0	2
Тема 7. Исследование химических равновесий спектрофотометрическим методом	4	2	0	2
Тема 8. Молекулярные колебания. ИК спектр	4	2	0	2
Тема 9. Спектрофотометры ИК диапазона. Конструкция. Техника измерений	4	2	0	2
Тема 10. Определение лития, магния, кальция, алюминия	4	0	2	2
Тема 11. Определение молибдена, вольфрама, ванадия	4	0	2	2
Тема 12. Определение хрома, марганца, железа, кобальта	4	0	2	2
Тема 13. Определение олова,	4	0	2	2

свинца, сурьмы, висмута				
Тема 14. Определение цинка, кадмия, ртути	4	0	2	2
Тема 15. Определение кобальта, никеля, меди	4	0	2	2
Тема 16. Определение фтора, бора, азота	4	0	2	2
Тема 17. Определение фосфора, мышьяка	4	0	2	2
Тема 18. Определение кислорода, серы, селена	4	0	2	2
Итого	72	18	18	36

III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
Тема 1. Электромагнитное излучение и его характеристики	Лекция	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 2. Взаимодействие с веществом электромагнитного излучения световых диапазонов (УФ,	Лекция	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения

видимое, ИК). Спектр поглощения		здоровьесберегающие технологии
Тема 3. Закон Бугера-Ламберта-Бера	Лекция	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 4. Отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бера	Лекция	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 5. Основные понятия УФ/вид спектрофотометрии	Лекция	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 6. Спектрофотометры УФ/вид диапазона. Конструкция. Техника измерений.	Лекция	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 7. Исследование химических равновесий спектрофотометрическим методом	Лекция	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии

Тема 8. Молекулярные колебания. ИК спектр	Лекция	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 9. Спектрофотометры ИК диапазона. Конструкция. Техника измерений	Лекция	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 10. Определение лития, магния, кальция, алюминия	лабораторная работа в химической лаборатории	технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 11. Определение молибдена, вольфрама, ванадия	лабораторная работа в химической лаборатории	технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 12. Определение хрома, марганца, железа, кобальта	лабораторная работа в химической лаборатории	технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 13. Определение олова, свинца, сурьмы, висмута	лабораторная работа в химической лаборатории	технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения

		здоровьесберегающие технологии
Тема 14. Определение цинка, кадмия, ртути	лабораторная работа в химической лаборатории	технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 15. Определение кобальта, никеля, меди	лабораторная работа в химической лаборатории	технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 16. Определение фтора, бора, азота	лабораторная работа в химической лаборатории	технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 17. Определение фосфора, мышьяка	лабораторная работа в химической лаборатории	технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 18. Определение кислорода, серы, селена	лабораторная работа в химической лаборатории	технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

1. Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-1 Способен выбирать и

использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации

Результат (индикатор)	Примерная формулировка заданий	критерии оценивания
ПК-1.1	<p>Задание 1: На УФ/вид-спектрофотометре СФ-2000 записать в видимом диапазоне спектр 0.1 моль/л раствора NiSO₄, учитывая, что молярный коэффициент поглощения аква-иона никеля – 5 л/(моль*см)</p> <p>Задание 2: На фотоколориметре КФК-2 измерить оптическую плотность в видимом диапазоне 0.01 моль/л раствора CuSO₄, учитывая, что молярный коэффициент поглощения аква-иона меди – 11 л/(моль*см)</p>	<p>Правильно выбрана кювета по материалу и толщине слоя – 1 балл.</p> <p>Правильно выбран спектральный диапазон или светофильтр – 1 балл.</p> <p>Правильно проведены действия с прибором – 1 балл.</p>
ПК-1.1	<p>Тест 1. Укажите правильный ответ. Какой раствор потребуется для проверки работы спектрофотометра в УФ-области?</p> <p>А. K₂Cr₂O₇.</p> <p>Б. K₂CrO₄.</p> <p>В. FeCl₃</p> <p>Тест 2. Укажите правильный ответ. Какие растворы понадобятся для проверки работы спектрофотометра в видимой области спектра?</p> <p>А. (NH₄)₂SO₄·CoSO₄ и CuSO₄;</p> <p>Б. (NH₄)₂SO₄·FeSO₄ и CuSO₄</p> <p>В. CoCl₂ и CuCl₂</p>	<p>1 балл за правильный ответ</p>
ПК-1.2	<p>Тест 1. Укажите правильные ответы. Факторы риска при работе со спектрофотометром СФ-2000.</p> <p>А. Переменный электрический ток 220 В;</p> <p>Б. Лазерное излучение;</p> <p>В. Ультрафиолетовое излучение;</p>	<p>1 балл за каждый правильный ответ</p>

	<p>Г. Магнитное поле высокой напряженности; Д. Высокая температура деталей.</p> <p>Тест 2. Укажите правильные ответы. Факторы риска при работе с фотоколориметром КФК-2. А. Переменный электрический ток 220 В; Б. Лазерное излучение; В. Ультрафиолетовое излучение; Г. Магнитное поле высокой напряженности; Д. Высокая температура деталей.</p>	
ПК-1.3	<p>Тест 1. Укажите правильные ответы. Какие из перечисленных веществ не имеют полос поглощения в средней ИК-области спектра? А. KCl Б. K₂CO₃ В. Na₃PO₄ Г. CH₃COONa Д. NaBr Е. CsF</p> <p>Тест 2. Укажите правильные ответы. Какие из перечисленных аква-ионов имеют полосы поглощения в видимой области спектра? А. Co²⁺ Б. Zn²⁺ В. Ti³⁺ Г. Cr³⁺ Д. Ga³⁺ Е. Pb²⁺</p>	1 балл за каждый правильный ответ

2. Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы

Результат (индикатор)	Примерная формулировка заданий	критерии оценивания
ПК-2.1	Можно ли спектрофотометрическим методом определить ступенчатые	1 балл за каждый

	константы образования для полилигандных комплексов? Почему?	правильный ответ
ПК-2.2	<p>Задание 1. Химик исследовал спектральные характеристики раствора в ультрафиолетовой области. Во время выполнения очередного эксперимента он случайно разбил кварцевую кювету, которую использовал для работы. Можно ли заменить ее такой же кюветой из обычного стекла? Почему?</p> <p>Задание 2. Какой светофильтр следует выбрать для фотометрирования раствора бихромата калия:</p> <p>А. синий; Б. зеленый; В. Желтый; Г. красный</p>	1 балл за каждый правильный ответ.

V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) основная литература:

1. Александрова Э. А. Аналитическая химия в 2 книгах. Книга 2. Физико-химические методы анализа : учебник для прикладного бакалавриата. — М. : Издательство Юрайт, 2017. — 351 с. Электронный ресурс. – Режим доступа: <https://biblio-online.ru/book/BD48501F-8E90-4AA4-B957-91554FA1D0D1/analiticheskaya-himiya-v-2-knigah-kniga-2-fiziko-himicheskie-metody-analiza>

б) дополнительная литература:

1. Фарус О.А. Физические и физико-химические методы анализа: лабораторный практикум : учебно-методическое пособие / О.А. Фарус, Г.И. Якушева. - Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2015. - 78 с. : ил. - Библиогр.: с. 60-62. - ISBN 978-5-4475-5682-2 ; То же [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=375309>
2. Аналитическая химия: Учебник / Мовчан Н.И., Романова Р.Г., Горбунова Т.С. и др. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 394 с.: <http://znanium.com/catalog/product/431581>
3. Зайцев Б.Е. Применение ИК-спектроскопии в химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.Е. Зайцев, О.В. Ковальчукова, С.Б. Страшнова. — Электрон. текстовые данные. — М. : Российский университет дружбы

народов, 2008. — 152 с. — 978-5-209-03292-2. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/11418.html>

4. Филимонова Н.И. Методы электронной спектроскопии [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.И. Филимонова, А.А. Величко, Н.Е. Фадеева. — Электрон. текстовые данные. — Новосибирск: Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, 2016. — 68 с. — 2227-8397. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/69546.html>

5. Строганова Е.А. Органическая химия: Практикум : учебное пособие /- Оренбург : Оренбургский государственный университет, 2013. - Ч. 3. Применение методов УФ, ИКи ПМР спектроскопии в структурном анализе органических соединений. - 115 с. : ил., схем. ; То же [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=260751>

6. Бёккер Ю. Спектроскопия / Ю. Бёккер ; пер. Л.Н. Казанцева. - Москва : РИЦ "Техносфера", 2009. - 528 с. - (Мир химии). - ISBN 978-5-94836-220-5 ; То же [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=88994>

7. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика: Учебное пособие / Ф.Ф. Литвин, В.Т. Дубровский и др.; Под ред. Ф.Ф.Литвина - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 263 с.: <http://znanium.com/catalog/product/444657>

8. Демин, В. В. Фотометрия и ее применение : учебное пособие / В. В. Демин, И. Г. Половцев. - Томск : Издательский Дом Томского государственного университета, 2017. - 344 с. - ISBN 978-5-94621-600-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1693508> (дата обращения: 25.06.2021).

9. Зырянов Г.В. Исследование оптических свойств растворов органических соединений методом абсорбционной спектрофотометрии в видимом и ультрафиолетовом свете : методические указания / Зырянов Г.В., Ким Г.А., Коротина А.В.. — Екатеринбург : Издательство Уральского университета, 2017. — 22 с. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/106382.html> (дата обращения: 25.06.2021).

2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Office профессиональный плюс 2013
- Microsoft Windows 10 Enterprise
- HyperChem
- программа управления спектрофотометром СФ-2000 «Сканирование для спектрофотометра СФ-2000»,
- программа управления спектрофотометром Bruker Alpha,

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» www.znanium.com;
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;
- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com>

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. Виртуальная образовательная среда ТвГУ (<http://moodle.tversu.ru>)
2. Научная библиотека ТвГУ (<http://library.tversu.ru>)
3. Электронная библиотека по химии и технике <http://rushim.ru/books/books.htm>
4. Химический портал ChemPort.Ru <http://www.chemport.ru>
5. Электронная библиотека учебных материалов по химии на портале Chemnet <http://www.chem.msu.su/rus/elibrary>
6. Российский химико-аналитический портал <http://www.anchem.ru/>
7. Сайт о химии <http://xumuk.ru/>
8. Сайт Chemworld.Narod.Ru -Мир химии <http://chemworld.narod.ru>

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

Вопросы для контроля самостоятельной работы студентов

Раздел 1. Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом

1. Привести уравнение, связывающее коэффициент пропускания T и оптическую плотность A .
2. Коэффициент пропускания T растворов с различными концентрациями вещества B равен: а) 78,5%; б) 57,0%; в) 27,8%; г) 4,5%. Какова оптическая плотность этих растворов?
3. Определить оптическую плотность растворов, коэффициент пропускания которых: а) 0,087; б) 0,415; в) 0,268; г) 0,765; д) 0,532; е) 0,337.
4. В чем сущность колориметрического, фотометрического и спектрофотометрического методов анализа?
5. Какие факторы влияют на молярный коэффициент поглощения?
6. В каких координатах можно представить спектр поглощения?
7. Какое влияние оказывает растворитель на электронный спектр молекулы?

8. Какие из указанных соединений: C_2H_6 , HCl , $NaNO_3$, $MnCl_2$, C_6H_6 — имеют полосы поглощения в ультрафиолетовой области (200 - 400 нм)? С какими электронными переходами связано это поглощение?
9. Какие из указанных соединений — Na_2CO_3 , $CuSO_4$, $NaCl$, H_2SO_4 , $KMnO_4$ — поглощают свет в видимой области спектра?

Раздел 2. Законы поглощения света

1. В чем причины приборных и химических отклонений от закона Бугера – Ламберта – Бера? Как избежать этих ошибок при проведении измерений?
2. При каких значениях оптической плотности образца возможно проведение количественных измерений?
3. Какой светофильтр следует выбрать для фотометрирования: а) тиоцианата железа $Fe(SCN)_3$; б) дихромат-иона $Cr_2O_7^{2-}$; в) перманганат-иона MnO_4^- ?
4. Будет ли сохраняться линейная зависимость оптической плотности от концентрации, если: а) состав анализируемого раствора с разбавлением не изменяется; б) при разбавлении раствора изменяется состояние определяемого вещества; в) при разбавлении раствора происходит диссоциация определяемого вещества, г) с изменением кислотности раствора происходит сдвиг равновесия, д) коэффициент преломления раствора существенно изменяется с изменением концентрации определяемого вещества?
5. Назовите основные узлы приборов для анализа по светопоглощению. Каково назначение каждого из этих узлов?
6. Как проводится выбор оптимальных условий фотометрических определений: а) длины волны; б) толщины светопоглощающего слоя (кюветы); в) концентрации?

Раздел 3. Спектроскопия ультрафиолетового и видимого диапазона

1. Содержание антрацена в растворе определяли по собственному поглощению при 253 нм. Относительная оптическая плотность стандартного раствора, содержащего 35,0 мг/л антрацена, равна $A_{отн.ст.} = 0,412$. У исследуемого раствора эта величина равна $A_{отн.х.} = 0,396$. В кювете сравнения в обоих случаях был раствор с содержанием 30,0 мг/л антрацена. Вычислить концентрацию (мг/л) антрацена в исследуемом растворе.
2. Что называют фотометрическим титрованием? Назвать особенности этого метода и области применения.
3. В каком случае в фотометрическом анализе используется свойство аддитивности оптической плотности?
4. Каким образом выполняется фотометрическое определение смеси двух веществ, если спектры поглощения определяемых компонентов: а) не

накладываются друг на друга: б) частично накладываются друг на друга; в) накладываются друг на друга на протяжении всей исследуемой области спектра?

5. Почему длина волны поглощения комплексоната меди не совпадает с длиной волны поглощения аква-комплекса меди?

6. Что такое спектрохимический ряд лигандов?

7. Молярный коэффициент светопоглощения дитизоната меди(II) в тетрахлориде углерода при $\lambda = 550$ нм равен 45200. Какую массовую долю (%) меди можно определить с дитизоном, если из навески образца сплава массой 1,00 г получают 25,00 мл раствора дитизоната в CCl_4 и измеряют минимальную оптическую плотность 0,020 в кювете 5,0 см?

8. Молярный коэффициент светопоглощения комплекса $\text{MoO}(\text{SCN})_5^{2-}$ в изоамиловом спирте при $\lambda = 475$ нм равен 15000. Вычислить минимальную массовую долю (%) молибдена в почве, которую можно определить этим методом, если из навески почвы массой 20,00 г извлекают молибден в 200,0 мл оксалатного буферного раствора. Отбирают 150,0 мл фильтрата и после соответствующей обработки экстрагируют образующийся $\text{MoO}(\text{SCN})_5^{2-}$ 15,00 мл изоамилового спирта. Экстракт фотометрируют в кювете 3,0 см. Минимальную оптическую плотность принимают равной 0,020.

9. Привести конкретные примеры использования в фотометрическом анализе для получения окрашенных веществ следующих типов химических реакций: а) комплексообразования; б) окисления—восстановления.

10. Привести примеры определений по собственному светопоглощению вещества.

Раздел 4. Инфракрасная спектроскопия

1. На чем основан качественный анализ по поглощению в инфракрасной области спектра?

2. Какие из приведенных молекул могут взаимодействовать с ИК-излучением: O_2 , N_2 , CCl_4 , CS_2 , CHCl_3 , $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$? Что происходит с молекулой при поглощении ИК-излучения?

3. Назвать основные типы молекулярных колебаний.

4. В чем сущность метода базовой линии?

5. Назвать достоинства и недостатки спектрофотометрии в инфракрасной области спектра.

6. В каком спектральном интервале в качестве источника света используют лампу накаливания, водородную лампу, штифт Нернста, силовый глобар, ртутную лампу?

7. Что такое функциональные группы? Как проводят идентификацию функциональных групп с помощью ИК-спектров?

8. Что такое характеристические частоты? Как выполняют структурный анализ по ИК-спектрам с помощью характеристических частот?

9. Из каких материалов изготавливают оптические детали приборов абсорбционной спектроскопии? Чем обусловлен выбор материала?

10. Для каких областей спектра предназначены приборы, оптические детали которых выполнены из: а) стекла; б) кварца; в) поваренной соли; г) флюорита?

1. Выполняя лабораторную работу, студент определил, что бесцветный раствор ацетона в воде имеет интенсивную полосу поглощения при 703 нм. Правильен или ошибочен полученный результат? Почему?

2. Один химик-аналитик разработал новую методику количественного определения содержания поверхностно-активных веществ в воде спектрофотометрическим методом, используя спектрофотометр СФ-2000, и опубликовал результаты в научном журнале. Другой химик, прочитав статью, попробовал применить эту методику, используя фотоэлектроколориметр КФК-3, однако получил иные значения оптической плотности для модельных растворов той же концентрации. Почему это произошло? Что нужно сделать второму химику, чтобы использовать новую методику и получать правильный результат?

3. Приготовили два раствора одного и того же вещества с концентрациями C_1 и C_2 . $C_1 = 2 C_2$. Каково количественное соотношение A_1 и A_2 , T_1 и T_2 при постоянной толщине слоя раствора?

4. В каких координатах принято представлять спектр поглощения? Перечислите возможные варианты для УФ/вид и ИК области.

5. Почему спектр поглощения имеет вид полос, а не отдельных линий?

6. Какие эффекты называют батохромным и гипсохромным сдвигом?

7. При прохождении света через слой раствора толщиной 1 см его интенсивность ослабляется на 10 %. Как изменится интенсивность света при прохождении через слой того же раствора толщиной 5 см?

8. Пропускание раствора составляет 58,5%. Рассчитайте его оптическую плотность.

9. После записи ИК-спектра октана студент решил вымыть использованную кювету хромовой смесью. Правильно ли его решение? Почему?

10. Можно ли методом ИК-спектроскопии качественно и количественно определить бензол и толуол в их смеси? Почему?

11. Выполняя дипломную работу, студент решил записать ИК-спектр глицинатного комплекса меди(II) в водном растворе. Сможет ли он корректно справиться с этой задачей? Почему?

12. Химик получил на складе склянку с химически чистым CCl_4 . Сможет ли он методом ИК-спектроскопии проверить, не содержит ли CCl_4 примеси других веществ? Как это сделать?

13. Оптическая плотность раствора сульфосалицилатного комплекса железа(III), измеренная в кювете с толщиной слоя 5 см, составляет 0,29.

Коэффициент поглощения комплекса 3000 л/(моль см). Рассчитайте молярную концентрацию железа в растворе.

14. Определите пропускание раствора дитизоната меди(II) в CCl_4 , если $l = 1$ см, $\epsilon = 45200$ л/(моль см), концентрация меди 10^{-5} моль/л.

15. Два студента определяли спектральные характеристики раствора комплексного соединения, используя для работы кюветы с толщиной слоя 5 см. Оказалось, что оптическая плотность раствора при λ_{max} слишком велика: $A = 3,1$. Тогда первый студент заменил кюветы другими, с толщиной слоя 1 см, а второй студент продолжал работать с теми же кюветами (5 см), разбавив раствор в 5 раз. Кто из студентов поступил правильнее? Почему?

16. Двум студентам было поручено определить спектральные характеристики (λ и ϵ) аква-иона меди(II) в водном растворе. Первый студент использовал для работы нитрат меди(II), второй студент – хлорид меди(II). Кто из студентов получит более точный результат? Почему?

Вопросы к зачету по дисциплине

1. Излучение УФ и видимого диапазона: свойства, механизм взаимодействия с молекулами и ионами.
2. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бера: реальные и кажущиеся (химические и приборные). Причины реальных и кажущихся отклонений. Диапазон значений оптической плотности, в котором возможен количественный анализ.
3. Приборы для электронной абсорбционной спектроскопии: фотоэлектроколориметр, однолучевой спектрофотометр, двухлучевой спектрофотометр. Особенности конструкции приборов и области их применения.
4. Применение спектроскопии УФ и видимого диапазона для качественного и количественного определения органических соединений.
5. Применение спектроскопии УФ и видимого диапазона для качественного и количественного определения неорганических и комплексных соединений.
6. Излучение ИК диапазона: свойства, механизм взаимодействия с веществом. Типы молекулярных колебаний.
7. Приборы для ИК спектроскопии: особенности конструкции ИК-спектрофотометров, отличие от УФ-спектрофотометров.
8. Применение ИК спектроскопии в аналитических и исследовательских целях.

Требования к рейтинг-контролю

1-й семестр

Максимальная сумма рейтинговых баллов по результатам текущей работы и промежуточных этапов оценки знаний студентов (рубежный контроль) составляет 100 баллов.

1 контрольная точка: Темы № 1 – 4

Текущая работа студента – 15 баллов

Представление отчетов о самостоятельном изучении тем в указанных формах – 15 баллов.

Итоговый контроль по модулю: письменная контрольная работа – 20 баллов.

Всего – 50 баллов

2 контрольная точка: Темы № 5 - 9

Текущая работа студента – 15 баллов

Представление отчетов о самостоятельном изучении тем в указанных формах – 15 баллов.

Итоговый контроль по модулю: письменная контрольная работа – 20 баллов.

Всего – 50 баллов

2-й семестр

Максимальная сумма рейтинговых баллов по результатам текущей работы и промежуточных этапов оценки знаний студентов (рубежный контроль) составляет 60 баллов.

1 контрольная точка: Темы № 10 – 15

Текущая работа студента – 10 баллов

Представление отчетов о самостоятельном изучении тем в указанных формах – 10 баллов.

Итоговый контроль по модулю: письменная контрольная работа – 10 баллов.

Всего – 30 баллов

2 контрольная точка: Темы № 16 – 18

Текущая работа студента – 10 баллов

Представление отчетов о самостоятельном изучении тем в указанных формах – 10 баллов.

Итоговый контроль по модулю: письменная контрольная работа – 10 баллов.

Всего – 30 баллов

Итого: 100 баллов

Лабораторные работы

Лабораторная работа 1. Определение длины волны и молярного коэффициента поглощения аква-иона меди (II)

Реактивы: 0,1 М раствор CuSO_4 .

Оборудование: спектрофотометр СФ-2000, набор стеклянных или кварцевых кювет с толщиной слоя 1 см – 10 шт.

Приготовьте 250 мл 0,1 моль/л раствора CuSO_4 , учитывая молярную массу кристаллогидрата $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, используемого для приготовления раствора. Для определения молярного коэффициента поглощения аква-иона меди приготовьте серию растворов в стаканчиках или небольших колбах, смешивая 0,1 М раствор CuSO_4 и воду в объемах, указанных в таблице:

Концентрация раствора CuSO_4 , моль/л	Объем 0,1 М раствора CuSO_4 , мл	Объем воды, мл	Оптическая плотность раствора, A
0,02	5	20	
0,03	6	14	
0,04	10	15	
0,05	10	10	
0,06	15	10	
0,07	14	6	
0,08	20	5	
0,09	18	2	
0,10	исходный раствор		

Установите кюветы в спектрофотометр и запишите спектр каждого раствора относительно кюветы с водой в диапазоне 600 – 900 нм. Найдите длину волны максимального поглощения аква-иона меди(II) λ_{max} . Найдите максимальную оптическую плотность каждого раствора серии при λ_{max} и занесите данные в таблицу. С использованием программы Origin или Excel постройте график зависимости оптической плотности от концентрации раствора. Убедитесь в линейности зависимости $A=f(C)$, то есть выполнении закона Бугера–Ламберта–Бера. С помощью процедуры отыскания линейной регрессии определите молярный коэффициент поглощения ϵ .

Лабораторная работа 2. Исследование влияния фонового электролита на спектр аква-иона меди (II)

Реактивы: 0,1 М раствор CuSO_4 , 2 М раствор KCl

Оборудование: спектрофотометр СФ-2000, набор стеклянных или кварцевых кювет с толщиной слоя 1 см – 10 шт.

Приготовьте 100 мл 2 моль/л раствора KCl и 100 мл 0,1 моль/л раствора CuSO_4 , учитывая молярную массу кристаллогидрата $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, используемого для приготовления раствора. Приготовьте серию растворов.

Для этого в стаканчиках или небольших колбах смешайте исходные растворы в объемах, указанных в таблице:

Объем 0,1 М раствора CuSO ₄ , мл	Объем 2 М раствора KCl, мл	Объем воды, мл	Оптическая плотность раствора, <i>A</i>
10	0	10	
10	1	9	
10	2	8	
10	5	5	
10	8	2	
10	9	1	
10	10	0	

Запишите спектр каждого раствора относительно кюветы с водой в диапазоне 600 – 900 нм. Найдите максимальную оптическую плотность каждого раствора серии по его спектру и занесите данные в таблицу. Сравните максимальную длину волны поглощения λ_{\max} и значение молярного коэффициента поглощения ϵ при соответствующей λ_{\max} для каждого раствора.

Лабораторная работа 3. Спектрофотометрическое исследование комплексообразования ионов меди (II) с иминодиуксусной кислотой методом молярных отношений

Реактивы: 0,05 М раствор CuSO₄, 0,05 М раствор иминодиуксусной кислоты NH(CH₂COOH)₂.

Оборудование: спектрофотометр СФ-2000, кварцевые кюветы с толщиной слоя 1 см – 10 шт.

Приготовьте 100 мл 0,05 моль/л раствора ИДА и 100 мл 0,05 моль/л раствора CuSO₄, учитывая молярную массу кристаллогидрата CuSO₄·5H₂O, используемого для приготовления раствора. Определите состав комплексов, образующихся в системе Cu(II) – ИДА методом молярных отношений лиганда. Для этого приготовьте серию растворов с постоянной концентрацией меди (II) и увеличивающимся молярным соотношением медь:ИДА $X_L = v_{\text{ИДА}}/v_{\text{Cu}}$ в соответствии с таблицей:

X_L	V_{CuSO_4}	$V_{\text{ИДА}}$	$V_{\text{вода}}$	<i>A</i>
0	5	0	15	
0.5	5	2.5	12.5	
1	5	5	10	
1.5	5	7.5	7.5	

2	5	10	5	
2.5	5	12.5	2.5	
3	5	15	0	

Запишите спектры растворов относительно кюветы с водой в диапазоне 500 – 900 нм. Измерьте оптическую плотность растворов при λ_{\max} . Постройте зависимость A от X_L . Определите графическим методом состав комплекса меди (II) с ИДА.

Лабораторная работа 4. Спектрофотометрическое исследование комплексообразования ионов меди (II) с иминодиуксусной кислотой методом изомолярных серий

Реактивы: 0,05 М раствор CuSO_4 , 0,05 М раствор иминодиуксусной кислоты $\text{NH}(\text{CH}_2\text{COOH})_2$.

Оборудование: спектрофотометр СФ-2000, кварцевые кюветы с толщиной слоя 1 см – 10 шт.

Определите состав комплексов, образующихся в системе Cu(II) – ИДА методом изомолярных серий. Для этого приготовьте серию растворов с постоянной суммарной концентрацией меди (II) и ИДА и изменяющимся молярным соотношением медь:ИДА $X_L = V_{\text{ИДА}}/V_{\text{Cu}}$ в соответствии с таблицей:

X_L	V_{CuSO_4}	$V_{\text{ИДА}}$	A
0,25	8	2	
0,43	7	3	
0,67	6	4	
1,00	5	5	
1,22	4,5	5,5	
1,50	4	6	
1,86	3,5	6,5	
2,33	3	7	
3,00	2,5	7,5	

Запишите спектры растворов относительно кюветы с водой в диапазоне 500 – 900 нм. Измерьте оптическую плотность растворов при λ_{\max} . Постройте зависимость A от X_L . Определите графическим методом состав комплекса меди (II) с ИДА.

Лабораторная работа 5. Фотоколориметрическое определение железа

Реактивы: сульфосалициловая кислота, конц. раствор аммиака, конц. азотная кислота, нитрат железа (III).

Оборудование: мерные колбы на 100 мл 8 шт, мерная колба на 500 мл, пипетка на 10 мл, пипетка на 50 мл. Спектрофотометр СФ 2000.

Железо (III) определяют фотоколориметрическим методом в виде комплекса с сульфосалициловой (2-гидрокси-5-сульфобензойной) кислотой. Железо (III) с сульфосалициловой кислотой образует различные по составу комплексы в зависимости от кислотности раствора. В кислой среде в интервале $\text{pH} = 1,8 - 2,5$ образуется моноссульфосалицилат железа $[\text{FeSSal}]$ красно-фиолетового цвета ($\lambda_{\text{макс}} = 510 \text{ нм}$, $\epsilon = 1800 \text{ л}/(\text{моль}\cdot\text{см})$). При $\text{pH} = 4,0 - 8,0$ доминирует дисульфосалицилат железа $[\text{Fe}(\text{SSal})_2]^{3-}$. В интервале $\text{pH} = 8,0 - 11,5$ образуется трисульфосалицилат железа $[\text{Fe}(\text{SSal})_3]^{6-}$ жёлтого цвета ($\lambda_{\text{макс}} = 416 \text{ нм}$, $\epsilon = 5800 \text{ л}/(\text{моль}\cdot\text{см})$). Трисульфосалицилат железа (III) достаточно устойчив и позволяет проводить определение железа в присутствии ацетат-, борат-, фосфат- и фторид-ионов.

Приготовьте 100 мл 10%-ного раствора сульфосалициловой кислоты.

Приготовьте 100 мл 10%-ного раствор аммиака.

Приготовьте кислый раствор нитрата железа (III), содержащий 100 мг железа в 1 л. Для этого в мерную колбу на 500 мл поместите 5 мл конц. азотной кислоты, 362 мг $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, долейте 300 мл воды и растворите при перемешивании соль, затем доведите раствор до метки и тщательно перемешайте.

Постройте калибровочный график по растворам комплекса $[\text{Fe}(\text{SSal})_3]^{6-}$, содержащим 1, 3, 5, 7, 9 и 11 мг железа в 1 л. Для этого в мерную колбу на 100 мл поместите необходимый объем 100 мг/л раствора нитрата железа (соответственно 1, 3, 5, 7, 9 и 11 мл). Добавьте 10 мл 10%-ного раствора сульфосалициловой кислоты и 10 мл 10%-ного раствора аммиака. Доведите раствор в колбе до метки дистиллированной водой и тщательно перемешайте. Через 5 минут запишите спектры растворов в диапазоне 400 – 600 нм. Постройте калибровочный график в координатах «оптическая плотность на волне 425 нм – содержание железа, мг/л».

Определите содержания железа в водопроводной воде, взяв пробу объемом 50 мл. По калибровочному графику определите концентрацию железа в пробе.

Лабораторная работа 6. Определение содержания в воде гидроксиэтилидендифосфоновой кислоты

Реактивы и оборудование: фотоэлектроколориметр, набор кювет, термостойкие стаканы на 100 мл - 6 шт., колбы мерные на 50 мл - 6 шт., мерный цилиндр на 50 мл, пипетки с делениями на 5 мл - 3 шт., 1%-ный

раствор $K_2S_2O_8$, 1%-ный раствор $SnCl_2$, серно-молибденовый реактив, раствор ОЭДФ с концентрацией 10 мг/л.

Приготовление серно-молибденового реактива:

1-й раствор: 180 мл конц. серной кислоты осторожно смешать со 180 мл дистиллированной воды и охладить до комнатной температуры.

2-й раствор: 20 г молибдата аммония растворить в 600 мл воды.

Оба раствора смешать и довести объем раствора до 1 л

1. Построение калибровочного графика

В пять стаканов поместите, соответственно, 0, 5, 10, 15, 20 и 25 мл стандартного раствора ОЭДФ (10 мг/л), доведите объем раствора водой до 40 мл, добавьте в каждый стакан 2 мл раствора $K_2S_2O_8$ кипятите на электроплитке 20 - 25 минут. В случае упаривания растворов добавляйте воду. После кипячения растворы охладите и количественно перенесите в мерные колбы на 50 мл. Добавьте в каждую колбу 5 мл серно-молибденового реактива и перемешайте. Через 3 минуты добавьте 5 капель раствора $SnCl_2$, перемешайте, доведите водой объем раствора до метки, перемешайте. Через 5 минут измерьте оптическую плотность раствора в кювете с толщиной слоя 1 см при светофильтре 750 нм. Постройте калибровочный график в координатах «оптическая плотность - концентрация ОЭДФ, мг/л».

2. Определение концентрации ОЭДФ в воде

Определение проводится аналогично пункту 1. Для анализа возьмите 25 мл воды. С помощью калибровочного графика определите содержание ОЭДФ в воде.

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

Проведение лабораторных работ обеспечено наличием необходимого оборудования: спектрофотометр УФ и видимой области СФ-2000, спектрофотометр ИК области Bruker Alpha, компьютер с установленным программным обеспечением. Для проведения лекций используется мультимедийный проектор.

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
.			

1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.			