

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ
Директор Института химии
д.х.н., профессор Горячева И.Ю.

"16" 06 2023 г.

Рабочая программа дисциплины
Спектральные методы

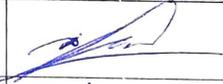
Направление подготовки специалитета
40.05.03 «Судебная экспертиза»

Специализация
«Экспертизы веществ, материалов и изделий»

Квалификация (степень) выпускника
Специалист

Форма обучения
очная

Саратов,
2023

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Дрозд Даниил Дмитриевич		16.06.23
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна		16.06.23
Заведующий кафедрой	Горячева Ирина Юрьевна		16.06.23
Специалист Учебного управления			

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Спектральные методы» являются:

- 1) формирование у будущего специалиста:
 - понимания дисциплины «Спектральные методы»;
 - знаний о сущности спектральных методов как инструмента изучения состава и строения вещества и использовании их для решения задач диагностики и идентификации в экспертной практике;
 - навыков межличностных отношений и способности работать в научном коллективе;
 - умения принимать нестандартные решения при разработке стратегий определения целевых веществ в различных объектах;
- 2) ознакомление с современным состоянием и развитием спектральных методов.
- 3) Формирование способности к выполнению профессиональных задач на основе умения выбирать и применять оптимальные подходы и экспериментальные решения, планировать, организовывать свою деятельность, самостоятельно приобретать знания, используя поиск и анализ информации из различных источников.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Общая и неорганическая химия (Б1.В.02) относится к дисциплинам по выбору части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1 «Дисциплины (модули)» рабочего учебного плана ООП по направлению 40.05.03 Судебная экспертиза, специализация «Экспертизы веществ, материалов и изделий» и осваивается в пятом семестре. Материал дисциплины базируется на знаниях по общей, неорганической, органической, и аналитической химии, методах математической статистики в экспертной деятельности в объеме курсов ООП по направлению «Судебная экспертиза» и является основой для последующего успешного прохождения практик и выполнения выпускной квалификационной работы.

3. Результаты обучения по дисциплине

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
ПК-2 Способен применять методики судебных экспертных исследований в профессиональной деятельности	ПК-2.1 Имеет представление о современных методиках экспертного исследования различных материальных объектов ПК-2.2 Осуществляет выбор конкретной методики в зависимости от объекта исследования, его свойств и характеристик	Знать <ul style="list-style-type: none">• физико-химические основы спектральных методов исследования в различных диапазонах электромагнитного излучения• возможности спектральных методов в определении состава и строения веществ и материалов.• применение спектральных методов для решения экспертных задач в части диагностики и идентификации;• приборы и основы пробоподготовки для спектральных исследований; Уметь: <ul style="list-style-type: none">• анализировать результаты проведенного исследования, ориентироваться в современной литературе по применению

	<p>ПК-2.3</p> <p>Применяет необходимые методики в процессе предварительных и экспертных исследований</p>	<p>спектральных методов в решении экспертных задач;</p> <ul style="list-style-type: none"> • проводить поиск научной и научно-технической информации, обработку данных, пользоваться электронными библиотеками спектров. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> • навыками работы на современном спектрометрическом оборудовании; информационными и компьютерными технологиями при проведении анализа реальных объектов.
--	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра)		
				лекции	Лабораторные занятия		СР	контроль	всего	Формы промежуточной аттестации (по семестрам)	
					Общая трудоемкость	Из них – практическая подготовка					
1	Диапазоны электромагнитного излучения и виды спектроскопии	5	1	2	-	-	6				Дискуссия
2	Спектроскопия оптического диапазона	5	2	2	4	-	6				Устный отчет
3	Основные законы светопоглощения. Качественный и количественный анализ.	5	3	2	4	-	6				Устный отчет
4	Требования к подготовке образцов для ИК-спектроскопии.	5	4	2	8	-	6				Устный отчет
5	ИК-спектрометры с Фурье-преобразованием сигнала.	5	5	2	8	-	6				Устный отчет Решение ситуационных задач
6	Работа с программным обеспечением и электронными	5	6	2	4	-	6				Устный отчет

	библиотеками спектров								
7	Упругое и неупругое (рамановское) рассеяние света	5	7	2	4	-	6		Устный отчет
8	Электронная молекулярная спектроскопия	5	8	2	4	-	6		Устный отчет
9	Спектрфлуориметрические измерения	5	9	2	-	-	6		Решение ситуационных задач на лекции
	Промежуточная аттестация								Зачет
	Всего			18	36		54		108

Содержание дисциплины «Спектральные методы»

1. Диапазоны электромагнитного излучения и виды спектроскопии.

Природа электромагнитного излучения. Физические процессы излучения и поглощения электромагнитных волн в различных диапазонах. Основные характеристики излучения (длина волны, частота, волновое число, поляризация).

2. Спектроскопия оптического диапазона.

Эффекты испускания света, поглощения, отражения, упругого и неупругого рассеяния. Основы теории поглощения и испускания света. Спектры поглощения и люминесценции. Переходы между уровнями. Вероятности переходов и правила отбора. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные энергии и переходы. Спектральные кривые. Ширина спектральных полос. Методы расчета молекулярных спектров.

3. Основные законы светопоглощения. Качественный и количественный анализ.

Прямые и обратные спектральные задачи. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Точность спектроскопических измерений. Кривая Шмидта. Представление результатов спектроскопических измерений. Качественный и количественный анализ по колебательным спектрам молекул. Анализ смесей методами ИК-спектроскопии.

4. Требования к подготовке образцов для ИК-спектроскопии.

Материалы для ИК-спектроскопии. Получение ИК-спектров газов, жидкостей, сухих остатков экстрактов, порошков, термопластов и реактопластов, композитов.

5. ИК-спектрометры с Фурье-преобразованием сигнала. Метод нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) и ИК-микроскопы

6. Работа с программным обеспечением и электронными библиотеками спектров. Программное обеспечение управления ИК Фурье-спектрометров. Электронные базы данных. Экспертные системы. Анализ колебательных спектров с помощью экспертных систем.

7. Упругое и неупругое (рамановское) рассеяние света. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР). Особенности пробоподготовки образцов.

8. Электронная молекулярная спектроскопия. Анализ вещества методами адсорбционной спектроскопии в ультрафиолетовой и видимой областях спектра. Применение электронной молекулярной спектроскопии в экспертной практике.

9. Спектрофлуориметрические измерения. Физические процессы при надтепловом излучении вещества – люминесценции. Спектры поглощения и люминесценции веществ.. Применение спектрофлуориметрии в экспертизах веществ, материалов, изделий.

5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины

При освоении дисциплины используются следующие образовательные технологии:

- интерактивные лекции с элементами междисциплинарного обучения.
- практические занятия с использованием инновационных методов обучения - неимитационные методы: групповые дискуссии, поисковая лабораторная работа.

Адаптивные образовательные технологии, применяемые при обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья и инвалидностью. При обучении студентов с ограниченными возможностями здоровья:

- необходимо создание комфортного психологического климата в студенческой группе;
- обеспечение студентов печатными и электронными образовательными ресурсами;
- проведение текущей и итоговой аттестации с учетом состояния здоровья обучающегося; в случае необходимости – предоставление дополнительного времени для подготовки ответа;
- оказание помощи студенту в организации самостоятельной работы;
- проведение индивидуальных консультаций;
- в случае необходимости содействие обучению по индивидуальному учебному плану или индивидуальному графику обучения.

Наиболее эффективным механизмом обучения является использование компьютерных технологий. Не выходя из дома, студенты с ограниченными возможностями здоровья, могут получать и осваивать учебный материал в спокойной обстановке, в удобном темпе и удобное время.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Самостоятельная работа студентов включает освоение теоретического материала, подготовку к лабораторным работам, оформление лабораторных работ, выполнение домашних заданий, подготовку к семинарски занятиям, решение ситуативных задач и разбор примеров, подготовку к тестированию. Оценочные средства текущего контроля включают:

- выполнение и оформление лабораторных работ
- разбор конкретных ситуаций
- оценку личностных качеств студента

Промежуточная аттестация студентов производится в форме зачета.

Вопросы к промежуточным отчетам

1. Экспертные задачи с получением качественных и количественных данных о молекулярном составе вещества.

2. Основы теории поглощения и испускания света. Переходы между уровнями. Вероятности переходов и правила отбора.
3. Представления ИК-спектров в различных координатах. Волновые числа. Виды полос поглощения. Выбор аналитических полос и базовой линии.
4. Прямые и обратные спектральные задачи. Основные законы светопоглощения и отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бера. Точность спектроскопических измерений.
5. Инструменты программного обеспечения ИК Фурье-спектрометров.
6. Работа с компьютерными атласами ИК-спектров и условия возможного получения некорректных результатов автоматизированного поиска.
7. Взаимодополнение методов ИК- и КР-спектроскопии.
8. Соотношение характеристик ИК дисперсионных и ИК Фурье-спектрометров. Преимущества и особенности ИК Фурье-спектрометров.
9. Сравнение чувствительности методов колебательной и электронной спектроскопии молекул.
10. Спектрофлуориметрические измерения.
11. Виды спектров люминесценции по механизму их возбуждения.
12. Области применения флуоресцентной спектроскопии в экспертной практике, типичные объекты исследования.
13. Области применения флуоресцентной спектроскопии в экспертной практике.

7. Данные для учета успеваемости студентов в БАРС

Таблица 1.1. Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности.

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Семестр	Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация	Итого
5	10	25	0	25	0	0	40	100

Программа оценивания учебной деятельности студента

5 семестр

Лекции – 0-10 баллов

0-1 баллов – студент посещает менее 60% лекции, не участвует в обсуждении проблемных задач, демонстрирует безразличие к задаваемым вопросам.

2-3 баллов – студент посещает более 60% лекции, не участвует в обсуждении проблемных задач, демонстрирует безразличие к задаваемым вопросам.

4-5 баллов – студент посещает более 70% лекции, редко участвует в обсуждении проблемных задач, делает попытки находить ответы на задаваемые вопросы.

6-7 баллов – студент посещает более 80% лекции, принимает участие в обсуждении проблемных задач, иногда дает правильные ответы к задаваемым вопросам.

8-9 баллов – студент посещает более 90% лекции, почти на каждой лекции участвует в обсуждении проблемных задач, предлагает их решение, в большинстве случаев дает правильный ответ на задаваемые вопросы.

10 баллов – студент посещает все лекции, активно участвует в обсуждении проблемных задач, предлагает нестандартные решения, практически всегда дает правильные ответы на поставленные лектором вопросы.

Лабораторные занятия – 0-25 баллов

0-12 баллов – лабораторная работа сдана значительно позже даты выполнения, значительные ошибки в оформлении и выполнении, которые не были исправлены в короткий срок.

13-20 баллов – лабораторная работа сдана позже даты выполнения, есть незначительные ошибки в оформлении, которые самостоятельно исправлены.

21-25 баллов – лабораторная работа сдана в день ее выполнения, оформлена грамотно и самостоятельно, практически без ошибок.

Практические занятия

Не предусмотрены

Самостоятельная работа – 0-25 баллов

0-8 баллов – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены со значительными ошибками, неполностью. Работа сдана не в срок.

9-17 баллов – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены с незначительными ошибками, полностью. Работа сдана в срок.

18-25 баллов – домашнее задание (задачи, подготовка к лабораторной работе) выполнены практически без ошибок, полностью. Работа сдана в срок.

Автоматизированное тестирование

Не предусмотрено

Другие виды учебной деятельности

Не предусмотрено

Промежуточная аттестация (зачет) – 0-40 баллов

Промежуточная аттестация проходит в форме зачета.

Зачет проводится в устной форме в виде собеседования по вопросу билета, на который студент должен дать полный развернутый устный ответ во время зачета. Преподаватель вправе задавать дополнительные вопросы по всему изучаемому материалу.

Критерии оценивания

36-40 баллов – дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос, показана совокупность осознанных знаний по дисциплине, доказательно раскрыты основные положения вопросов; в ответе прослеживается четкая структура, логическая последовательность, отражающая сущность раскрываемых понятий, теорий, явлений. Знание по предмету демонстрируется на фоне понимания его в системе данной науки и междисциплинарных связей. Ответ изложен литературным языком с использованием современной терминологии. Могут быть допущены недочеты в определении понятий, исправленные студентом самостоятельно в процессе ответа.

30-35 баллов – дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос, показано умение выделить существенные и несущественные признаки, причинно-следственные связи. Ответ четко структурирован, логичен, изложен литературным языком с использованием современной терминологии. Могут быть допущены 2-3 неточности или незначительные ошибки, исправленные студентом с помощью преподавателя.

23-29 баллов – дан недостаточно полный и недостаточно развернутый ответ. Логика и последовательность изложения имеют нарушения. Допущены ошибки в раскрытии понятий, употреблении терминов. Студент не способен самостоятельно выделить существенные и несущественные признаки и причинно-следственные связи. В ответе отсутствуют выводы. Умение раскрыть значение обобщенных знаний не показано. Речевое оформление требует поправок, коррекции.

0-22 баллов – ответ представляет собой разрозненные знания с существенными ошибками по вопросу. Присутствуют фрагментарность, нелогичность изложения. Студент не осознает связь обсуждаемого вопроса по билету с другими объектами дисциплины. Отсутствуют выводы, конкретизация и доказательность изложения. Речь неграмотная, терминология не используется. Дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя не приводят к коррекции ответа студента.

Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за пятый семестр по дисциплине «Спектральные методы» составляет 100 баллов.

Таблица 2.1 Таблица пересчета полученной студентом суммы баллов по дисциплине «Спектральные методы» в зачет:

56 баллов и более	«зачтено»
меньше 56 баллов	«не зачтено»

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Спектральные методы»

а) литература:

1. Чичинин А.И. Атомная и молекулярная спектроскопия : Учебник / А. И. Чичинин. - Атомная и молекулярная спектроскопия, 2030-03-06. - Новосибирск : Новосибирский государственный университет, 2019. - 884 с. - URL: <http://www.iprbookshop.ru/93805.html>. - ISBN 978-5-4437-0927-7 : ~Б. ц. - Текст : непосредственный (ЭБС «IPR BOOKS»)
2. Бёккер Ю. Спектроскопия : [монография] / Ю. Бёккер ; пер. с нем. Л. Н. Казанцевой ; под ред. А. А. Пупышева, М. В. Поляковой. - Москва : Техносфера, 2009. - 527, [1] с. : рис. - (Мир химии). - ISBN 978-5-94836-220-5 (в пер.). - ISBN 978-3-80231-581-2 (нем.) : 748.00 р. - Текст : непосредственный. (10 экз.)
3. Пентин Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии : учеб. пособие / Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина. - Москва : Мир ; [Б. м.] : БИНОМ. Лаб. знаний, 2008. - 398, [2] с. - (Методы в химии). - Библиогр.: с. 392-393 (21 назв.). - ISBN 978-5-94774-765-2 (БИНОМ.ЛЗ) (в пер.). - ISBN 978-5-03-003846-9 (Мир) : 330.00 р., 370.00 р., 248.90 р., 363.00 р. - Текст : непосредственный. (56 экз.)

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Microsoft Windows Pro 7 (Номер лицензии: OpenLicense № 46312747 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07.) (70 шт.); MicrosoftWindowsVistaBusinessНомер лицензии: № 42226296, от 21.12.2009. (21 шт.);
2. Microsoft Office Standard 2003 SP3 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07.) (2 шт.);
3. Microsoft Office Professional 2003 (№ контракта 048K/07 на основании распоряжения [О лицензионном ПО] №46 от от 06.07.07); Office 2007 Suites (№ ИОП 47/08 от 07.07.2008) (10 шт.).
4. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса- Стандартный Russian Edition. 1500-2499 Node 1 year Educational Renewal License № лицензии 0B00160530091836187178.
5. Программный продукт к ИК-Фурье спектрометру Шимадзу 1800.
5. Программный продукт к ИК-Фурье спектрометру с библиотеками ИК-спектров Omnic 9.2.41.

Сайты: www.anchem.ru, <http://www.xumuk.ru/>, <http://www.nehudlit.ru/books/subcat281.html>

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины «Спектральные методы»

- Лекционные аудитории с мультимедийным проектором.
- Спектрометры Шимадзу 1800 с программным обеспечением и СФ-2000.
- Учебные лаборатории;
- Препараты, растворители, лабораторная посуда и оборудование;

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 40.05.03 «Судебная экспертиза» специализация «Экспертиза веществ, материалов и изделий».

Автор: проф. д.х.н. Дрозд Д.Д.

Программа одобрена на заседании кафедры общей и неорганической химии от 16.06 .2023 года, протокол № 10.