

Аннотация рабочей программы дисциплины (модуля) Спектральные исследования вещественного состава

Цель дисциплины - способствовать успешной подготовке бакалавров по направлению «Геология» к научно- производственной работе и формирования у студентов навыков спектральных исследований вещественного состава горных пород и руд в частности.

Задачи дисциплины:

- 1) Дать представления об основных принципах использования спектроскопических методов анализа.
- 2) Развивать аналитические способности студентов в осмыслении основных естественных процессов.
- 3) Дать практические навыки использования современных спектроскопических методов анализа.

Формируемые компетенции и индикаторы их достижения по дисциплине (модулю)

Коды компетенции	Содержание компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции
ОПК - 3	способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания математики и естественных наук	<p>Знать: базовые знания математики и естественных наук для решения задач спектральных исследований вещественного состава горных пород.</p> <p>Уметь: использовать базовые знания математики и естественных наук при использовании спектральных исследований вещественного состава горных пород.</p> <p>Владеть: навыками использования при использовании спектральных исследований вещественного состава горных пород базовых знаний математики и естественных наук.</p>
ПК-1	способность использовать знания в области геологии, геофизики, геохимии, гидрогеологии и инженерной геологии, геологии и геохимии	<p>Знать: базовые знания в области геологии, геофизики, геохимии, гидрогеологии и инженерной геологии, геологии и геохимии горючих ископаемых, экологической геологии для решения научно-исследовательских задач.</p> <p>Уметь: использовать знания в области геологии, геофизики, геохимии, гидрогеологии и инженерной геологии, геологии и геохимии горючих ископаемых, экологической геологии для решения научно-исследовательских задач.</p> <p>Владеть: навыками использования знаний в области геологии, геофизики, геохимии, гидрогеологии и инженерной геологии, геологии и геохимии горючих ископаемых, экологической геологии для решения научно-исследовательских задач.</p>

Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Магнитнорезонансные методы

Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного

резонанса. Заселенность уровней энергии, насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР, типы спектрометров. Характер образцов. ЯМР спектроскопия органических и неорганических веществ. Области применения. Место ЭПР спектроскопии среди других спектроскопических методов. Принципы спектроскопии ЭПР. Спин-орбитальное взаимодействие и g-фактор. Связь анизотропии g-фактора с геометрией окружения парамагнитного центра. Природа сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Константы СТВ. Природа тонкого взаимодействия. Константы расщепления в нулевом поле. Интерпретация спектров ЭПР. Спектры ЭПР жидких растворов. Спектры ЭПР поликристаллов и твердых растворов. Спектры ЭПР монокристаллов. Особенности спектров ЭПР газов. ЭПР-спектроскопия в практике анализа. Изотопный анализ. Определение металлов. Определение физиологически активных веществ в биологических средах. Применение в археологии и палеонтологии. Контроль имитации драгоценных минералов.

Тема 2. Методы ИК спектроскопии

Теоретические основы ИК спектроскопии. Колебания и структура молекул. Качественный анализ. Классификация методов: анализ смеси органических веществ, идентификация индивидуального соединения, структурно-групповой анализ. Подготовка проб к анализу. Выбор оптимальных условий записи спектра: толщина поглощенного слоя, рабочий диапазон длин волн, скорость сканирования, ширина щелей. Количественный анализ по ИК – спектрам: причины отклонения от закона Бугера – Ламберта – Бера, методы количественного анализа (по градуировочному графику, метод внутреннего стандарта, дифференциальный метод). Спектры поглощения и отражения. Анализ смесей. Условия проведения анализа. Современные методы ИК спектроскопии. ИКС диффузного отражения с Фурье-преобразованием.

Тема 3. Атомный спектральный анализ

Диспергирующие элементы (призма, дифракционная решетка). Параметры спектральных приборов: дисперсия, разрешающая сила, светосила прибора. Монохроматоры и полихроматоры. Светофильтры, их классификация. Приемники излучения. Классификация. Классические приемники излучения. Фотографическая эмульсия. Принцип действия и основные характеристики. Фотоэлектрические устройства. Классификация. Фотоэлемент, принцип действия и основные характеристики. Фотоэлектронные умножители (ФЭУ). Принципиальная схема и основные характеристики. Современные приемники излучения. Фотодиодная линейка, фотодиодная матрица. Принципиальная схема и основные характеристики. Прибор с зарядовой связью (ПЗС). Принцип работы. ПЗС линейка, ПЗС-матрица. Основные характеристики ПЗС: квантовая эффективность, разрешающая способность. Приборы сканирующие, одно и многоканальные. Стилόμεтры, квантометры. Основные характеристики, область применения. Дуга постоянного тока. Основные параметры плазмы дуги постоянного тока. Испарение пробы, атомизация вещества. Процессы в плазме дуги, влияющие на интенсивность спектральных линий. Метрологические характеристики дугового разряда постоянного тока. Низковольтная активизированная дуга переменного тока. Температура и электронная плотность. Механизм испарения и парообразования вещества. Высоковольтная конденсированная искра. Температура искры. Испарение пробы. Интенсивность спектральных линий в искровом разряде. Практическое применение и метрологические характеристики. Плазмотрон. Принцип работы. Температура и электронная концентрация. Влияние некоторых параметров на интенсивность спектральных линий. Метрологические характеристики. Пламена. Структура пламени, температура и состав. Излучение пламен. Факторы, влияющие на парообразование и атомизацию вещества. Степень ионизации. Влияние состава пробы на атомизацию. Аналитическое применение пламен и метрологические характеристики. Газоразрядные трубки пониженного давления.

Полый катод. Испарение пробы. Аналитическое применение полого катода и метрологические характеристики. Высокочастотная индуктивносвязанная аргоновая плазма. Схема горелки высокочастотной индуктивносвязанной аргоновой плазмы. Испарение, атомизация пробы и возбуждение спектров испускания. Аналитическое применение. Влияние на интенсивность спектральных линий и пределы обнаружения. Стандарты в спектральном анализе. Методы определения концентраций вещества в пробе. Гомологическая пара. Классификация по способам регистрации. Спектрографический метод анализа. Аппаратура. Качественный, полуколичественный и количественный анализ. Спектрометрический метод анализа. Атомноэмиссионный анализ различных материалов (токопроводящие и токонепроводящие материалы, растворы). Атомно-флуоресцентный метод анализа. Принцип метода. Аппаратура. Аналитические характеристики. Атомно-абсорбционная спектроскопия. Основы метода. Метод ААС с атомизацией пробы в пламени. Аппаратура. Метрологические характеристики и мешающие влияния. Метод ААС с электротермическим способом атомизации пробы. Типы электротермических атомизаторов. Ход анализа. Характеристики аналитических сигналов и их измерение. Механизмы испарения и атомизации пробы в графитовых печах. Аналитические характеристики.

Тема 4. Спектрофотометрия

Законы поглощения электромагнитного излучения. Основной закон поглощения, закон аддитивности оптических плотностей. Причины отклонений от основного закона поглощения. Условия регистрации электронных спектров поглощения молекул. Анализ многокомпонентных систем. Определение числа компонентов. Использование координат изобестических точек и точек экстремумов при анализе спектральных кривых. Простейшие тесты для определения числа компонентов (одно- и двухкомпонентные системы). Определение числа компонентов по рангу матрицы оптических плотностей. Определенные и переопределенные системы уравнений Фирордта. Выбор аналитических длин волн. Определение коэффициентов поглощения. Селективное определение одного компонента в многокомпонентной системе. Методы, не учитывающие поглощение посторонних компонентов. Методы предполагающие линейную зависимость поглощения посторонних компонентов от длины волны. Методы, учитывающие нелинейный характер поглощения посторонних компонентов от длины волны. Методы, требующие предварительного выделения посторонних компонентов. Производная абсорбционная молекулярная спектроскопия. Основные особенности производных спектров.

Тема 5. Рентгеновская спектроскопия

Понятие рентгеновского спектра. Классификация методов рентгеновской спектроскопии. Рентгеновская эмиссия, рентгеновская абсорбция, рентгеновская флуоресценция. Непрерывное (тормозное) и характеристическое (линейчатое) рентгеновское излучение. Понятие рентгеноспектрального анализа (РСА). Классификация методов РСА по способу генерации рентгеновского излучения. Электронно-зондовый рентгеноспектральный микроанализ (РСМА), рентгенофлуоресцентный анализ (РФА), рентгенорадиометрический анализ (РРА). Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС). Фотоэффект. Уравнение Эйнштейна. Энергии связи фотоэлектронов. Работа выхода электрона. Качественный анализ. Спектры остовных уровней в РФЭС. Тонкая структура рентгеновских фотоэлектронных линий. Химические сдвиги в РФЭС. Фазовый анализ поверхности на основе химических сдвигов спектральных линий. Количественный анализ. Ожеэлектронная спектроскопия (ОЭС). Принципы и область использования. Рентгенофлуоресцентный метод анализа. Основы метода. Аппаратурные основы РФЛА, методики анализа проб и обработки результатов. Оценка пределов обнаружения. Разрешающая способность и спектральные наложения. Приготовление проб и использование стандартных образцов. Приборы для рентгеновского анализа. Спектрометры с волновой дисперсией, спектрометры с энергетической дисперсией. Основные блоки приборов и условия проведения эксперимента.