

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики**

В.В. Иванов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Спектроскопия веществ и материалов. Спектральные базы данных
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 15 час.

Всего часов: 45, всего зач. ед.: 1

Программу составил: В.С. Попов, канд. хим. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры химической физики 27.05.2021

Аннотация

Курс "Спектроскопия веществ и материалов. Спектральные базы данных" предусматривает ознакомление обучающихся с основными принципами современных спектральных методов физико-химических исследований веществ и материалов, использованных в изобразительном искусстве при создании объектов культурного наследия.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Целью курса является ознакомление обучающихся с основными принципами современных спектральных методов физико-химических исследований веществ и материалов, использованных в изобразительном искусстве при создании объектов культурного наследия.

Задачи дисциплины

Формирование базовых знаний и представлений о фундаментальных законах взаимодействия излучений с веществом, а также основных принципах спектральных методов исследования состава и строения веществ и материалов, использованных в изобразительном искусстве при создании объектов культурного наследия, техники проведения современных спектральных исследований, методов пробоподготовки и интерпретации полученных результатов, в том числе с использованием спектральных баз данных.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- теоретические основы методов исследования строения и состава веществ и материалов
- физические принципы работы оборудования для проведения спектральных исследований веществ и материалов;
- специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости;
- критерии оценки статистической значимости экспериментальных данных.

уметь:

- планировать стратегию установления состава и строения веществ и материалов, использованных в изобразительном искусстве при создании объектов культурного наследия;
- готовить образцы для проведения различных спектральных исследований состава и строения веществ и материалов;
- использовать современные спектральные приборы и различные методики проведения экспериментов;
- обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные, полученные с помощью спектральных методов исследования состава и строения веществ и материалов в том числе с использованием спектральных баз данных.

владеть:

- методологией выбора и использования спектральных методов исследования необходимых для установления состава и строения того или иного веществ и материалов, использованного в объекте культурного наследия;
- способами работы с современными базами спектральных данных веществ и материалов;
- способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества;
- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных спектральных методов исследования состава и строения веществ и материалов.

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

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение	2			1
2	UV-VIS-NIR спектроскопия	4			2
3	ИК-спектроскопия	4			2
4	Спектроскопия комбинационного рассеяния	4			2
5	Люминесцентная спектроскопия	4			2
6	Рентгеновская спектроскопия	4			2
7	Методы лазерной спектроскопии	4			2
8	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	2			1
9	Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса	2			1
Итого часов		30			15
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		45 час., 1 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Введение

Основные сведения о принципах взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. Классификация спектральных методов.

2. UV-VIS-NIR спектроскопия

Физические основы UV-VIS-NIR спектроскопии и характер получаемой в результате данного исследования информации о веществе. Принципиальное устройство UV-VIS-NIR спектрофотометров и их практически важные конфигурации. Практическое применение UV-VIS-NIR спектроскопии при исследовании веществ и материалов.

3. ИК-спектроскопия

Физические основы ИК-спектроскопии. Принципы работы ИК спектрометров и регистрации ИК-спектров. Особенности и преимущества спектроскопии с преобразованием Фурье в различных вариантах (FTIR, ATR-FTIR, DRIFTS); Методы и приемы подготовки проб в ИК спектроскопии. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру. Визуализационная спектроскопия (imaging spectroscopy) и её применение при исследовании предметов искусства. Базы данных ИК спектров

4. Спектроскопия комбинационного рассеяния

Физические основы спектроскопии комбинационного рассеяния (Рамановской спектроскопии). Принципиальное устройство спектрометра комбинационного рассеяния. Практическое применение спектроскопии комбинационного рассеяния. Примеры анализа спектров неорганических соединений по спектрам КР. Базы данных спектров комбинационного рассеяния.

5. Люминесцентная спектроскопия

Понятие о процессах люминесценции в веществе. Механизмы возбуждения при флуоресценции и фосфоресценции. Принципиальное устройство приборов для люминесцентной спектроскопии и их отличие от приборов для абсорбционной спектроскопии. Возможности метода по исследованию строения веществ и материалов. Практическое применение методов люминесцентной спектроскопии.

6. Рентгеновская спектроскопия

Виды рентгеноспектральных методов исследования. Рентгенофлуоресцентный анализ: принцип метода, устройство приборов, примеры практического применения для анализа состава веществ и материалов. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия: принцип метода, устройство приборов, примеры практического применения для исследования строения веществ и материалов

7. Методы лазерной спектроскопии

Виды лазерной спектроскопии. Спектроскопии лазерно-индуцированного пробоя (LIBS): принцип метода, устройство приборов, примеры практического применения для анализа состава веществ и материалов в составе объектов культурного наследия.

8. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса

Основы ЯМР-спектроскопии. ЯМР-спектры. ЯМР-спектрометры. Практическое применение ЯМР-спектроскопии

9. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, снабженная доской, экраном, проектором.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. - М.: Мир, 2006. - 683 с.
2. Отто М. Современные методы аналитической химии (3-е издание). М.: Техносфера, 2008. - 544 с.
3. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия: основы, техника, аналитическое применение / Пер. с англ. Б. Н. Тарасевича, под ред. А. А. Мальцева. — М.: Мир, 1982. — 328 с.
4. Технология и исследование произведений станковой и настенной живописи. Учебное пособие. Под ред. Ю.И.Гренберга. - М.: ГосНИИР, 2000 г. – 177 с.
5. Rull F., Caumon M.-C., Dubessy I. Raman spectroscopy applied to the earth sciences and cultural heritage. – London: The Mineralogical Society of Great Britain and Ireland, 2012. - 504 p.
6. Larkin P. J. Infrared and Raman spectroscopy: principles and spectral interpretation. - Elsevier, 2011. – 230 p.
7. Łojewski T., Łydzba-Kopczyńska B. Spectroscopy in the Analysis of Artworks // book chapter in «Molecular spectroscopy-experiment and theory: from molecules to functional materials». 2019, P. 483-517

Дополнительная литература

1. Ефимов А.М., Постников Е.С. Физические основы и формализм оптики и спектроскопии оптических материалов. Учеб. пособие. – СПб: Университет ИТМО, 2015. – 111 с.
2. Raman spectroscopy in cultural heritage: Background paper // Anal. Methods, 2015, 7, 4844
3. Balakhnina I. A. et al. Statistical approximation of Fourier transform-IR spectroscopy data for zinc white pigment from twentieth-century Russian paintings // Journal of Applied Spectroscopy (2017) Vol. 84, No. 3, P. 484-489
4. Cotte M. et al. Cultural and Natural Heritage at the ESRF: Looking Back and to the future // Synchrotron Radiation News, (2019) Vol. 32, № 6, P. 34-40.
5. Striova J. Dal Fovo A. Fontana R. Reflectance imaging spectroscopy in heritage science // La Rivista del Nuovo Cimento (2020) 43, 515–566
6. Limbeck A. et al. Methodology and applications of elemental mapping by laser induced breakdown spectroscopy // Analytica Chimica Acta (2021), 1147, P. 72-98
7. Carter, S. et al. Atomic spectrometry update. Review of advances in the analysis of metals, chemicals and materials // Journal of Analytical Atomic Spectrometry (2013) Vol. 28, № 12, P. 1814-1869
8. Luque de Castro M.D., Jurado-López A. The role of analytical chemists in the research on the cultural heritage // Talanta 205 (2019) 120 1062

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Не предусмотрено.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет	
Разработчик:	В.С. Попов, канд. хим. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Спектроскопия веществ и материалов. Спектральные базы данных» обучающийся должен:

знать:

- теоретические основы методов исследования строения и состава веществ и материалов
- физические принципы работы оборудования для проведения спектральных исследований веществ и материалов;
- специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости;
- критерии оценки статистической значимости экспериментальных данных.

уметь:

- планировать стратегию установления состава и строения веществ и материалов, использованных в изобразительном искусстве при создании объектов культурного наследия;
- готовить образцы для проведения различных спектральных исследований состава и строения веществ и материалов;
- использовать современные спектральные приборы и различные методики проведения экспериментов;
- обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные, полученные с помощью спектральных методов исследования состава и строения веществ и материалов в том числе с использованием спектральных баз данных.

владеть:

- методологией выбора и использования спектральных методов исследования необходимых для установления состава и строения того или иного веществ и материалов, использованного в объекте культурного наследия;
- способами работы с современными базами спектральных данных веществ и материалов;
- способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества;
- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных спектральных методов исследования состава и строения веществ и материалов.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы для проведения дифференцированного зачета:

1. Понятие о процессах взаимодействия электромагнитного излучения с веществом.
2. Стратегия проведения исследования состава и строения веществ спектральными методами в объектах культурного наследия
3. Принцип работы UV-VIS-NIR спектрофотометров
4. Практическое применение UV-VIS-NIR спектроскопии
5. Принципы работы ИК-Фурье спектрометров
6. Практическое применение ИК спектроскопии к анализу строения веществ
7. Применение визуализационной спектроскопии
8. Принципы работы спектрометра комбинационного рассеяния
9. Практическое применение спектроскопии комбинационного рассеяния
10. Принципы работы приборов для люминесцентной спектроскопии
11. Возможности методов люминесцентной спектроскопии по исследованию строения веществ и материалов.
12. Принципы работы приборов для рентгенофлуоресцентного анализа
13. Практическое применение рентгенофлуоресцентного анализа для анализа состава веществ и материалов.
14. Принципы работы приборов для рентгеновской фотоэлектронная спектроскопии
- 15.
16. Практическое применение рентгеновской фотоэлектронная спектроскопии для исследования строения веществ и материалов.
17. Принципы проведения исследований методом спектроскопии лазерно-индуцированного пробоя.
18. Практическое применение спектроскопии лазерно-индуцированного пробоя для анализа состава и строения веществ и материалов объектов культурного наследия
19. Спектральные базы данных и их использование при анализе спектральных данных.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении устного дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.