

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный
исследовательский государственный университет"**

Факультет естественных наук

УТВЕРЖДАЮ



Декан ФЕН НГУ, профессор

Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

**Физические методы в катализе и адсорбции:
Оптическая спектроскопия в адсорбции и
катализе**

**Модульная программа лекционного курса,
практикума и самостоятельной работы студентов**

Курс IV–й, VIII семестр

Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов IV курса факультета естественных наук, направление подготовки 020201 «Фундаментальная и прикладная химия (специалист)». В состав пособия включены: программа курса лекций, структура курса и правила ИКИ, программа практикума по применению оптической спектроскопии для изучения химических процессов на поверхности пористых тел. Кроме того, приведен набор задач для самостоятельной работы студентов с использованием учебной литературы и персонального компьютера.

Составители

д.х.н. Паукштис Е.А., доц.

© Новосибирский государственный университет, 2014 **Содержание**

Аннотация рабочей программы	4
1. Цели освоения дисциплины	5
2. Место дисциплины в структуре ООП	6

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины	7
4. Структура и содержание дисциплины	9
Рабочий план (по неделям семестров)	10
4а. Программа курса лекций	12
4б. Практикум	13
5. Образовательные технологии	15
6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины	16
Рекомендованная литература к теоретическому курсу	16
Правила ИКИ	17
Домашние задания	17
Практикум по оптической спектроскопии в адсорбции и катализе	19
Литература к практикуму	21
Перечень теоретических вопросов к экзамену по органической химии	21
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	23
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины	25
Аннотация рабочей программы	

Модуль «Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе» входит в состав дисциплины «Физические методы в катализе и адсорбции» и относится к вариативной части (профильные дисциплины) профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «0202010 Фундаментальная и прикладная химия» (квалификация (степень) специалист). Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой катализа и адсорбции.

Содержание модуля охватывает круг вопросов, связанных со строением и свойствами органических соединений, их превращениями, областями их применения и основными методами их промышленного и лабораторного производства (синтеза).

Модуль нацелен на формирование у выпускника общекультурных компетенций: ОК-11, ОК-12, ОК-15, ОК-16; профессиональных компетенций: ПК-3, ПК-4, ПК-5, ПК-7, ПК-11.

Преподавание модуля предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия (практикум), домашние задания, консультации, сдача зачета, самостоятельная работа студента.

Программой модуля предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль. Прохождение студентами курса проходит с использованием системы ИКИ (индивидуального кумулятивного индекса). В течение курса студенты проходят следующие контрольные точки: сдают 1 зачет и сдают два домашних задания. Все контрольные точки оцениваются баллами, и к концу каждый студент набирает некоторую сумму баллов, которая при преодолении заранее определенного барьера (см. стр.17 и далее) привести к получению им допуска к зачету.

Итоговый контроль. Итоговую оценку за курс студент может получить на устном экзамене-зачете в конце курса. На зачете он имеет возможность либо повысить оценку. Получение оценки-автомата не предусматривается.

Общая трудоемкость модуля составляет 1,5 зачетных единицы. Всего 54 академических часа. Программой модуля предусмотрены 12 часов лекционных, 12 часов лабораторных работ, 6 часов прохождения контрольных точек в течение семестров (включая домашние задания), а также 24 часа самостоятельной работы студентов.

1. Цели освоения дисциплины

Модуль «Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе» предназначен для того, чтобы ознакомить студентов с основами предмета. На лекциях даются основные представления о происхождении ИК и УФ-Вид спектров, о аппаратуре используемой для регистрации спектров, а также об особенностях использования этих методов для изучения химических процессов на поверхности пористых тел. На практических лабораторных занятиях прививаются начальные навыки регистрации ИК и УФ-Вид спектров, что, позволяет улучшить восприятие теоретического материала.

В курсе лекций приводятся краткие исторические сведения о зарождении оптической спектроскопии. Напоминаются физические основы появления спектров поглощения и рассеяния при взаимодействии вещества с молекулами, излагаемые в курсе строения вещества.. Описаны принципиальные схемы устройства и принципа действия современных приборов, а также типичные ошибки при использовании методов оптической спектроскопии в адсорбции и катализе.

Основной целью освоения модуля является усвоение студентами основных положений оптической спектроскопии, навыков анализа литературных данных (актуально в связи с публикацией в научных статьях по изучению гетерогенных катализаторов содержащих грубые ошибки), обучению планирования экспериментов с использованием методов оптической спектроскопии.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Модуль «Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе» входит в состав дисциплины «Физические методы в катализе и адсорбции» и относится к вариативной части (профильные дисциплины) профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020201 Фундаментальная и прикладная химия» (квалификация (степень) специалист).

Модуль «Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе» опирается на следующие дисциплины данной ООП:

- Физическая химия (строение и свойства атома, природа химической связи, химическая реакция, понятия о кинетике и термодинамике реакций, кислотно-основные равновесия);
- Неорганическая химия (строение и свойства атомов, строение молекул, химическая связь);
- Основы компьютерной грамотности (навыки обращения с ПК);
- Аналитическая химия (химические равновесия, органические соединения как лиганды);
- Строение вещества.

Результаты освоения модуля «Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- Научно-исследовательская практика;
- Итоговая государственная аттестация.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины:

- **общекультурные компетенции:**
 - *способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области информатики и современных информационных технологий, наличием навыков использования программных средств и работы в компьютерных сетях, умением создавать базы специальных данных и использовать ресурсы сети Интернет (ОК-11);*
 - *способностью ориентироваться в создающихся условиях производственной деятельности и к адаптации в новых условиях (ОК-12);*
 - *способностью самостоятельно применять методы и средства познания, обучения и самоконтроля для приобретения новых знаний и умений, в том числе в новых областях, непосредственно не связанных со сферой деятельности (ОК-15);*
 - *способностью в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей (ОК-16);*
- **профессиональные компетенции:**
 - *способностью использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ПК-3);*
 - *использованием основных законов естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применением методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ПК-4);*
 - *знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, наличием представлений о системе*

фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-5);

- пониманием необходимости и способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владением ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций (ПК-7);
- знанием основ теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии) (ПК-11).

В результате освоения модуля обучающийся должен:

- иметь представление о физических принципах появления спектров поглощения и излучения при взаимодействии электромагнитного излучения с веществом, принципом работы и устройством оптических приборов.
 - знать круг задач в области исследования гетерогенных катализаторов, для которых возможно применение методов оптической спектроскопии;
- уметь планировать эксперимент по изучению химии поверхности пористых высокодисперсных веществ.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1,5 зачетных единицы, всего 54 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	С е м е с т	Н е д е л я с е	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
-------	-------------------	----------------------------	--------------------------------------	--	---

		р	мес тра	Л ек ци я	С е м и на р ск и е з а н я т и я	Л а б о р · р а б о т а	К о н т р · р а б о т а	К о л л о к в и у м ы	Д о м а ш н и е з а д а н и я	С а м о с т · р а б о т а	З а ч е т	Э к з а м е н
1.1	Теоретический раздел использования оптической спектроскопии в адсорбции и катализе	8	1-3	12					2	10		Домашнее задание
1.2	Практическое использование методики ИКС адсорбированных молекул и УФ-Вид спектроскопии в интересах дипломной работы.	8	7-10			12			2	10		Домашнее задание
										4	2	Зачет
Всего за курс:				12		12			4	24	2	

Рабочий план (по неделям семестра)

Неделя	Темы занятий
Февраль 1-3	Место семинара – лекции (учебный класс в Институте катализа СО РАН).
1-я неделя	Лекция 1. Исторический экскурс в зарождение методов оптической спектроскопии. Единицы измерения спектральной информации. Лекция 2. Происхождение колебательных спектров. Устройство и принципы работы ИК, ИК-Фурье спектрометров.
2-я неделя	Лекция 3. Задачи оптической спектроскопии в адсорбции и катализе, в том числе измерение кислотности поверхности. Лекция 4. Использование ИКС для изучения механизмов каталитических реакций на поверхности.
3-я неделя	Лекция 5. Происхождение спектров поглощения в УФ-

	<p>Вид диапазоне. Устройство и принцип работы спектрометров.</p> <p>Лекция 6. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Устройство Рамановских спектрометров. Специальные методики для изучения колебательных спектров молекул адсорбированных на поверхности. Выдача контрольных домашних заданий.</p>
АПРЕЛЬ 2-я неделя	Практикум 1 для подгрупп 1 и 2. Контроль выполнения домашнего задания. Ознакомление с оборудованием и разбор подходов к моделированию ИК спектров органических молекул. Получение задания по моделированию ИК спектров двух органических молекул индивидуально для каждого студента. Постановка задачи для эксперимента по низкотемпературной адсорбции СО
3-я неделя	Практикум 2 для подгрупп 1 и 2. Проведение экспериментальной работы и прием результатов моделирования ИК спектров. Обучение методам количественного охарактеризования кислотных свойств поверхности.
4-я неделя	Практикум 3 для подгрупп 1 и 2. Контроль результатов моделирования ИК спектров. Разбор задачи по измерению кислотности поверхности на основании ИК спектров адсорбированного СО измеренных в предыдущем занятии. Сдача зачета.
МАЙ 2-я неделя	Практикум 1 для подгрупп 3 и 4. Контроль выполнения домашнего задания. Ознакомление с оборудованием и разбор подходов к моделированию ИК спектров органических молекул. Получение задания по моделированию ИК спектров двух органических молекул индивидуально для каждого студента. Постановка задачи для эксперимента по низкотемпературной адсорбции СО
3-я неделя	Практикум 2 для подгрупп 3 и 4. Проведение экспериментальной работы и прием результатов моделирования ИК спектров. Обучение методам количественного охарактеризования кислотных свойств поверхности.

4-я неделя	Практикум 3 для подгрупп 3 и 4. Контроль результатов моделирования ИК спектров. Разбор задач по измерению кислотности поверхности на основании ИК спектров адсорбированного СО измеренных в предыдущем занятии. Сдача зачета.
------------	--

4.а Программа курса лекций

Общее знакомство с методами оптической спектроскопии в адсорбции и катализе: область энергий электромагнитного излучения подпадающих под методы оптической спектроскопии, выделение колебательной спектроскопии, (ИКС и КР), УФ-вид спектроскопии и флуориметрии, краткая история использования методов оптической спектроскопии в адсорбции и катализе, современное использование методов оптической спектроскопии в гетерогенном катализе.

Природа колебательных спектров и УФ-Вид спектров (понятие колебательных переходов, выделение энергетических уровней соответствующих колебаниям молекул; понятие электронных переходов, отвечающих УФ-Вид диапазону электромагнитного излучения; колебания двухатомных молекул, гармоническое приближение, потенциал Морзе; колебания многоатомных молекул, связь числа колебаний с симметрией молекул и числом атомов; интенсивность поглощения, правила отбора, симметрия колебаний; характеристические полосы поглощения, понятие хромофорной группы, связь структуры соединений с его ИК и УФ спектрами, простейшие методы анализа спектров. УФ-вид спектроскопия металлических кластеров и наночастиц.

Устройство современных спектрометров: двухлучевые спектрометры, источники излучения, монохроматоры, приемники излучения; Фурье спектрометры, интерферометры, принципы обработки информации; устройство КР спектрометров, лазерные источники излучения; флуориметры

Характеризация поверхности гетерогенных катализаторов с помощью ИКС адсорбированных молекул: функциональные группы на поверхности катализаторов; метод спектраль-

ных зондов, используемые зонды; понятие силы кислотных центров, основных центров; разделение на Льюисовские и Бренстедовские центры; шкала сродства к протону (РА) для измерения силы бренстедовских кислотных центров; понятие жестких и мягких кислот и оснований; теплота адсорбции как мера силы льюисовских центров; методы измерения силы центров, проведение эксперимента по низкотемпературной адсорбции СО на поверхности оксидного катализатора.

Использование ИКС при изучении механизмов каталитических реакций: методология применения ИКС для изучения механизмов каталитических реакций; примеры эффективного использования метода; изучение механизмов реакций в условиях *in situ*.

Количественные измерения в спектроскопии адсорбированных молекул: закон Бугера-Ламберта-Бера для измерения поверхностных концентраций; измерение числа центров, понятие стехиометрии взаимодействия центров и молекул зондов.

Применение УФ-Вид спектроскопии в гетерогенном катализе: теория кристаллического поля и поля лигандов, специфика d-элементов; спектры органических молекул, хромофорные группы, влияние строения органических молекул.

Использование пакета HyperChem для анализа колебаний газовых молекул: расчет ИК спектров простейших органических молекул, анализ формы колебания путем визуализации колебаний молекул.

46 Практикум

Приготовление образцов для изучения спектров адсорбированных молекул: приготовление таблеток из порошков катализаторов с толщиной порядка 0.1 мм и размерами 1x3 см. Проведение эксперимента по низкотемпературной адсорбции СО на поверхность катализатора.

Регистрация спектров диффузного отражения образцов гетерогенных катализаторов: регистрация ИК спектра порош-

ка катализатора на Фурье спектрометре с приставкой диффузного отражения; регистрация УФ-Вид спектра порошка катализатора на двухлучевом спектрометре с приставкой диффузного отражения.

Количественная обработка спектральной информации в программном пакете ORIGIN: подготовка спектра для работы с программой, перевод стандарта спектрометра в DAT файл; построение спектра; корректировка базовой линии, разложение суммарного контура на индивидуальные компоненты, измерение концентрации кислотных центров.

5. Образовательные технологии

Виды/формы образовательных технологий. Особенностью курса является применение в нем модульно-рейтинговой системы (см. аннотацию), при реализации которой постоянно контролируется уровень знаний студента. Наличие обязательных для итоговой аттестации студента контрольных точек принуждает к активной работе студента в течение всего семестра.

Уникальной формой обучения студентов в рамках курса «оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе» является моделирование колебательного спектра органических молекул с помощью пакетов программ Gaussian-80 или Hyperchem. Занятия проводятся самостоятельно в терминальном классе в ИК СО РАН либо на собственных ПК студента (по выбору).

Практикум по оптической спектроскопии содержит приготовление тонких таблеток анализируемого вещества для проведения эксперимента по измерению ИК спектров адсорбированного СО при 77К. Проведение соответствующего эксперимента на современном ИК-Фурье спектрометре. Измерение УФ-Вид и ИК спектров диффузного отражения. В ходе обсуждения с преподавателем выполненной синтетической работы студент должен с использованием имеющихся у него сведений, аргументировано защитить достоверность полученных им данных. В практикуме студенты зачастую исследуют образцы не только необходимые для их собственной экспериментальной дипломной работы, но и не изученные в литературе.

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

При прохождении курса «оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе» студенты работают по системе ИКИ (индивидуальный кумулятивный индекс). Эта система предусматривает прохождение контрольных точек (домашних заданий), набранные баллы суммируются, и составлена таким образом, что текущий контроль охватывает все разделы курса. Студент, независимо от набранных баллов сдает устный зачет и может повысить общую оценку в конце прохождения курса.

Каждая обязательная контрольная точка проходит строго в установленный срок, который указан в Программе семинаров. При прохождении контрольной точки за пределами установленного срока (без уважительной причины) она принимается со «штрафом», т. е. вводится коэффициент 0.5 на каждый набранный сверх 50 % балл.

Все контрольные точки, не пройденные в срок (без уважительной причины), в виде исключения могут быть сданы в течение двух недель за пределами установленного срока (со штрафом).

Работа студента на семинарах оценивается преподавателем, ведущим семинары, по теме текущего семинара, поэтому студенту следует заранее прорабатывать материал к семинару. Студент может получить баллы за выполнение самостоятельных мини-работ и/или за быстрое и правильное решение задач на семинаре (по усмотрению преподавателя). Суммарное количество баллов за этот пункт выставляется преподавателем в конце курса.

Рекомендованная литература к теоретическому курсу

1. Пешкова В. М. Методы абсорбционной спектроскопии в аналитической химии: учеб. пособие для хим. спец. ун-тов / В. М. Пешкова, М. И. Громова; под ред. И. П. Алимариной - М.: Высшая школа, 1976 - 280 с.
2. Плюснин В. Ф. Краткий курс строения вещества: Электронная спектроскопия координационных соединений: учебное пособие / В.Ф. Плюснин, Н.М.

- Бажин; Новосиб. гос. ун-т - Новосибирск: Редакционно-издательский центр НГУ, 1995 - 96 с
3. Плюснин В. Ф. Курс строения вещества. Атомная спектроскопия: учебное пособие: [для студентов физических и химических факультетов университетов] / В.Ф. Плюснин; Федер. агентство по образованию, Новосиб. гос. ун-т, Фак. естеств. наук - Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2010 - 156 с
 4. Основы оптических методов анализа: Метод. пособие для студ. 3 курса фак. естеств. наук / Новосиб. гос.ун-т, Каф. аналит. химии; [Сост. И.В. Миронов] - Новосибирск: НГУ, 1991 - 68 с
 5. Пентин Ю. А. Основы молекулярной спектроскопии: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 011000 - Химия и направлению 510500 - Химия / Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина - Москва: Мир, 2008 - 398 с.
 6. Паукштис Е.А. «Применение ИК спектроскопии в гетерогенном кислотно-основном катализе. Новосибирск, Наука 1992.
 7. Давыдов А.А. «ИК спектроскопия адсорбированных молекул на окислительных катализаторах», Новосибирск, Наука, 1982.,
 8. Davydov A., Molecular spectroscopy of oxide catalyst surfaces. Chichester: Willey, 2003
 9. Киселев А.В., Лыгин В.И. «ИК спектры поверхностных соединений и адсорбированных молекул» Наука, Москва. 1973.

Правила ИКИ

При прохождении курса «органическая химия» студенты работают по системе ИКИ (индивидуальный кумулятивный индекс). Эта система предусматривает прохождение контрольных точек (домашних заданий), набранные баллы(за 100 баллов за каждое выполненное задание) суммируются, и составлена таким образом, что текущий контроль охватывает все разделы курса.

Все контрольные точки, являются *обязательными*. Их прохождение – *необходимое условие* для получения допуска на сдачу зачета

Итоговая оценка за курс выставляется на зачете.

Когда студент сдает устный зачет, то баллы суммируются с баллами ИКИ и ставится итоговая оценка за курс:*

- – «отлично» (800-1200 баллов и более, т.е. $\geq 80\%$),
- – «хорошо» (700 – 799 баллов, т.е. $\geq 70\%$),
- – «удовлетворительно» (550 – 699 баллов, т.е. $\geq 55\%$),
- – «неудовлетворительно» (менее 550 баллов, т.е. $< 55\%$).

Контрольные точки

Баллы

КЗ1 (Контрольная задача 1): Дать определение таких понятий, как оптическая плотность, коэффициент пропускания, единицы измерения энергии в спектроскопии, длина волны и волновое число, а также виды источников излучения, способы регистрации световых сигналов, дать ответ на вопрос о том, что такое обертон, составное колебание, что такое валентное и деформационное колебание, что такое гармоническое колебание	100
КЗ2 (Контрольная задача 2): Расчитать колебательные спектры двух молекул из ряда: метан, этан, этилен, метанол, этанол, ацетон, пропилен, метилхлорид, метилфторид, фтористый метилен, диметиловый эфир, формальдегид, муравьиная кислота, уксусная кислота, углекислый газ, оксид углерода. Сравнить с экспериментальными спектрами.	100
ИТОГО	200

Домашние задания.

Практикум по «Оптической спектроскопии в адсорбции и катализе»

*

Практикум по Оптической спектроскопии в адсорбции и катализе имеет цель научить студентов основным приемам работы, принятым в настоящее время в каталитических группах, а также привить некоторые экспериментальные навыки, необходимые при работе с катализаторами.

При оценке работы преподаватель учитывает:

1. Знание студентом химической сути выполняемой работы
2. Умение быстрого освоения экспериментальных методик.
3. Скорость освоения работы с программным обеспечением спектрометров и программ обработки спектральной информации.

На первом занятии студенты знакомятся с основами техники безопасности и правилами работы в лаборатории с оптическим и вакуумным и прессовым оборудованием. Следует знать все о наличии в лаборатории противопожарных средств и о способах их применения. Студентов знакомят с мерами предупреждения несчастных случаев и порядком действия в критических ситуациях. Рассматриваются приемы оказания первой помощи при порезах, при отравлениях органическими и неорганическими веществами. На этом же занятии происходит знакомство с типами лабораторных вакуумных установок, на которых будет выполняться основной эксперимент. *Без персональной росписи студент к работе в лаборатории не допускается!* Грубое нарушение правил техники безопасности влечет за собой проведение внеочередного инструктажа или даже отстранение от практикума с последующей не аттестацией по курсу вообще.

Кроме того, на первом занятии происходит ознакомление с основными навыками работы по литературе [1.2].

Образец записи в рабочем журнале

Образец

Дата

Лаборатория владельца образца

Температура очистки катализатора от загрязнений

Вес и толщина таблетки (мг и мг/см²)

Давления СО, при которых был снят спектр.

Имена файлов, в которых были запомнены спектры.

Итоговая таблица измерения кислотности.

Дата

Образец

Температура вакуумирования

Льюисовские центры

Бренстедовские центры

1 тип		2 тип		3-тип		1 тип		2 тип		3-тип	
ν СО, см-1	$N, 10^{-6}$ моль /г	ν СО, см-1	$N, 10^{-6}$ моль /г	ν СО, см-1	$N, 10^{-6}$ моль /г	ν СО, см-1	$N, 10^{-6}$ моль /г	ν СО, см-1	$N, 10^{-6}$ моль /г	ν СО, см-1	$N, 10^{-6}$ моль /г

Литература к практикуму

1. Паукштис Е.А. Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе. Применение ИК спектроскопии. Институт катализа им. Борескова СО РАН, 2010.
2. Паукштис Е.А., Ларина Т.В., Глазнева Т.С., Шалыгин А.С. А.С. Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе. Часть 2. Спектроскопия в УФ и Видимом диапазонах. Новые методики колебательной спектроскопии для изучения поверхности. Гос. контракт П253. Институт катализа им. Борескова СО РАН, 2012.

Перечень вопросов к зачету по оптической спектроскопии в адсорбции и катализе

1. Происхождение (физические основы) ИК спектров поглощения.
2. Происхождение (физические основы) УФ-Вид спектров поглощения органических веществ.
3. Происхождение (физические основы) Рамановских спектров.
4. Происхождение (физические основы) УФ-Вид спектров поглощения комплексов переходных элементов.
5. Происхождение (физические основы) спектров флюоресценции.
6. Устройство и принцип работы двухлучевого ИК спектрометра.
7. Устройство и принцип работы двухлучевого ИК-Фурье спектрометра.
8. Устройство и принцип работы Рамановского спектрометра.
9. Устройство и принцип работы двухлучевого УФ-Вид спектрометра.

10. Устройство и принцип работы флюориметра.
11. Закон Бугера-Ламберта-Бэра (с выводом).
12. Принципы измерения кислотно-основных свойств поверхности.
13. Метод спектральных зондов.
14. Методология исследования механизмов каталитических реакций.
15. Измерение термодинамических характеристик адсорбции молекул зондов на поверхности катализаторов. **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

а) основная литература:

1. Пешкова В. М. Методы абсорбционной спектроскопии в аналитической химии: учеб. пособие для хим. спец. ун-тов / В. М. Пешкова, М. И. Громова; под ред. И. П. Алимарина - М.: Высшая школа, 1976 - 280 с.
2. Плюснин В. Ф. Краткий курс строения вещества: Электронная спектроскопия координационных соединений: учебное пособие / В.Ф. Плюснин, Н.М. Бажин; Новосиб. гос. ун-т - Новосибирск: Редакционно-издательский центр НГУ, 1995 - 96 с
3. Плюснин В. Ф. Курс строения вещества. Атомная спектроскопия: учебное пособие: [для студентов физических и химических факультетов университетов] / В.Ф. Плюснин; Федер. агентство по образованию, Новосиб. гос. ун-т, Фак. естеств. наук - Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2010 - 156 с
4. Основы оптических методов анализа: Метод. пособие для студ. 3 курса фак. естеств. наук / Новосиб. гос. ун-т, Каф. аналит. химии; [Сост. И.В. Миронов] - Новосибирск: НГУ, 1991 - 68 с
5. Пентин Ю. А. Основы молекулярной спектроскопии: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специ-

- альности 011000 - Химия и направлению 510500 - Химия / Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина - Москва: Мир, 2008 - 398 с.
6. Паукштис Е.А. «Применение ИК спектроскопии в гетерогенном кислотно-основном катализе. Новосибирск, Наука 1992.
 7. Давыдов А.А. «ИК спектроскопия адсорбированных молекул на окислительных катализаторах», Новосибирск, Наука, 1982.,
 8. Davydov A., Molecular spectroscopy of oxide catalyst surfaces. Chichester: Willey, 2003
 9. Киселев А.В., Лыгин В.И. «ИК спектры поверхностных соединений и адсорбированных молекул» Наука, Москва. 1973.

в) дополнительная литература:

1. Паукштис Е.А. Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе. Применение ИК спектроскопии. Институт катализа им.Борескова СО РАН, 2010.
2. Паукштис Е.А., Ларина Т.В., Глазнева Т.С., Шалыгин А.С. *Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе. Часть 2. Спектроскопия в УФ и Видимом диапазонах. Новые методики колебательной спектроскопии для изучения поверхности. Гос. контракт П253.* Институт катализа им.Борескова СО РАН, 2012.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- **Приборы:**
 - ИКФурье-спектрометр Shimadzu 8300 FTIR
 - УФ-спектрометр Shimadzu 2401
 - [Приставки диффузного отражения ISF-240, DRS-8000](#)
- [Дополнительная техника](#)
 - Вакуумная установка для тренировки образцов и запуска адсорбатов.
 - Пресс высокого давления с усилием до 20 тонн

- Вакуумные ИК кюветы с вариацией температуры прокаливания(тренировки) до 1073 К и измерения спектров от 77 до 773К
- Персональные компьютеры с необходимым ПО (12), в учебном классе, мультимедийный проектор, ноутбуки, экраны.


Лабораторная техника:

Агатовая ступка для растирания порошков. Система терморегулирования температуры тренировки образцов.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с ОС ВПО, принятым в ФГАОУ ВО Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, с учетом рекомендаций ООП ВПО по направлению «020201 Фундаментальная и прикладная химия».

Автор:

Паукштис Евгений Александрович, д.х.н., доцент, кафедры адсорбции и катализа ФЕН, зав. лаб. ИК СО РАН _____


подпись

Программа одобрена на заседании кафедры адсорбции и катализа "21" апреля 2014 г.

Секретарь кафедры к.х.н., ассистент _____  И.В.Делий