

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Кафедра хімічного матеріалознавства

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Перший проректор

\_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення, сорбції та  
іонного обміну**

напряму підготовки 0703 хімія  
для спеціальності 8.070301 хімія  
спеціалізації „Дизайн матеріалів і хімічна інформатика”  
хімічного факультету

Кредитно-модульна система  
організації навчального процесу

Харків – 2009

Робоча програма навчальної дисципліни „Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення, сорбції та іонного обміну” для студентів за напрямом підготовки 0703 хімія, спеціальністю 8.070301 хімія.

Розробники: **Холін Юрій Валентинович, д.х.н., професор, зав. кафедри хімічного матеріалознавства, Христенко Інна Василівна, к.х.н., ст. викл. кафедри хімічного матеріалознавства**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол № \_\_\_ від “\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2009 р.

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ Холін Ю.В.

“\_\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № \_\_\_ від “\_\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

“\_\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Голова \_\_\_\_\_

Юрченко О.І.

### 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів 3.5	Напрямок підготовки 0703 хімія	денна форма навчання за вибором
Модулів – 2	Спеціальність 8.070301 хімія	Рік підготовки: V -й
Загальна кількість годин 192		Семестр 9 -й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 4 самостійної роботи студента – 4.6		Лекції 36 год.
		Лабораторні 36 год.
	Самостійна робота 82 год.	
	Освітньо-кваліфікаційний рівень: магістр	Вид контролю: залік екзамен

### 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

**Мета:** навчити студентів використовувати комплекс експериментальних методів та розрахункових засобів кількісного фізико-хімічного аналізу (КФХА) для дослідження рівноваг у системах різного типу, в першу чергу, за участю функціоналізованих матеріалів.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

**знати:** засади КФХА як сукупності експериментальних та розрахункових засобів визначення стехіометричного складу, термодинамічних та інших фізико-хімічних параметрів сполук, що утворюються при реакціях в розчинах та на поверхні сорбційних та іонообмінних матеріалів, узагальнення та узгодження інформації, що міститься у масивах даних КФХА.

**вміти:** використовувати комплекс експериментальних методів та розрахункових засобів КФХА для дослідження рівноваг у системах різного типу, в першу чергу, за участю функціоналізованих матеріалів.

### 3. Програма навчальної дисципліни

#### Модуль 1. Лекції

Тема 1. Мета і засади кількісного фізико-хімічного аналізу. Історичні етапи розвитку КФХА. Значущість результатів КФХА для хімічної теорії та практики.

Тема 2. Основні поняття КФХА. Метод сталої іонної сили. Концентраційні, змішані та термодинамічні константи рівноваги.

Тема 3. Термодинамічні основи застосування КФХА для вивчення процесів у гетерогенних системах. Поняття сорбція, сорбтив, сорбат, адсорбція, ізотерма сорбції, термодинамічні характеристики адсорбційних рівноваг. Коефіцієнт розподілу. Експериментальне вимірювання ізотерм адсорбції компонентів розчинів. Вимірювання ізотерм адсорбції у статичному режимі. Метод окремих наважок та умови виконання експерименту. Вимірювання ізотерм адсорбції в динамічному режимі.

Тема 4. Засади планування експерименту з визначення констант рівноваги. Характеристика експериментальних методів. Приклади вдалих і невдалих планів експерименту.

Тема 5. Вимірювання ізотерм адсорбції та розподілу компонентів розчинів. Вимірювання ізотерм у статичному режимі. Метод окремих наважок та умови виконання експерименту. Вимірювання ізотерм в динамічному режимі.

Тема 6. Визначення складу комплексів графічними методами. Метод насичення. Метод Остромисленського-Жоба. Метод Б'єррума.

Тема 7. Визначення констант стійкості комплексів дослідженням допоміжних функцій. Метод напівцілих значень функції утворення. Метод Скетчарда. Методи, основані на лінеаризації рівняння ізотерми Ленгмюра. Опрацювання експериментальних даних в пакетах Excel, Origin.

Тема 8. Кооперативні взаємодії при зв'язуванні лігандів функціоналізованими матеріалами. Причини кооперативних ефектів, засоби їх виявлення та кількісного врахування. Модель полідентатного зв'язування та принципи її параметричної ідентифікації.

Тема 9. Основи комп'ютерного визначення параметрів моделей комплексоутворення. Визначення критерію збіжності моделі з експериментом. Призначення статистичних ваг. Методи мінімізації критеріальної функції (нульового, першого, другого та псевдодругого порядків). Боротьба з надлишковістю моделей. Аналіз адекватності моделі за допомогою глобальних і локальних критеріїв. Методи верифікації моделей.

Тема 10. Використання програми CLINP для параметричної ідентифікації моделей рівноваг у розчинах за даними методів рН-метрії, спектрофотометрії, розчинності, розподілу.

Тема 11. Використання програми CLINP для параметричної ідентифікації моделей рівноваг сорбції, іонного обміну на поверхні функціоналізованих матеріалів.

Тема 12. Характеристика відомостей про особливості процесів комплексоутворення на поверхні функціоналізованих матеріалів за даними КФХА.

Тема 13. Оцінювання енергетичної неоднорідності поверхонь за даними адсорбційних експериментів. Програма CAS.

## **Модуль 2. Лабораторні заняття**

Тема 14. Зважування на напівмікротерезах ВЛМ-1

Тема 15. Мікрометоди очистки речовин (мікроперегонка, мікроперекристалізація з використанням ампули, висушування речовин, визначення температури кипіння).

Тема 16. Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.

Тема 17. Хроматографічні методи аналізу.

Тема 18. Вимірювання ізотерм адсорбції.

Тема 19. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.

Тема 20. Кислотно-основні властивості поліелектролітів. Визначення констант кислотної дисоціації катіонів.

#### 4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
л		п	лаб	інд	ср	
1	2	3	4	5	6	7
<b>Модуль 1 – лекції</b>						
Тема 1	5	2			1	3
Тема 2	5	2			1	3
Тема 3	7	4			1	3
Тема 4	5	2			1	3
Тема 5	5	2			1	3
Тема 6	5	2			1	3
Тема 7	5	2			1	3
Тема 8	5	2			2	3
Тема 9	7	4			2	3
Тема 10	8	4			2	4
Тема 11	6	2			2	4
Тема 12	7	4			2	3
Тема 13	7	4			2	3
Разом за модулем 1	96	36			19	41
<b>Модуль 2 – лабораторні заняття</b>						
Тема 14	4			2	1	2
Тема 15	8			4	3	4
Тема 16	6			2	3	4
Тема 17	9			4	3	5
Тема 18	16			8	3	8
Тема 19	14			6	3	8
Тема 20	20			10	3	10
Разом за модулем 2	96			36		41
<b>Усього годин</b>	192	36		36	19	82

#### 5. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
14	Зважування на напівмікротерезах ВЛМ-1	2
15	Мікрометоди очистки речовин (мікроперегонка, мікроперекристалізація з використанням ампули, висушування речовин, визначення температури кипіння)	4
16	Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів	2
17	Хроматографічні методи аналізу	4
18	Вимірювання ізотерм адсорбції	8
19	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування	6
20	Кислотно-основні властивості поліелектролітів. Визначення констант кислотної дисоціації катіонів.	10

## 6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	ср	пір
Тема 1. Мета і засади кількісного фізико-хімічного аналізу. Історичні етапи розвитку КФХА. Значущість результатів КФХА для хімічної теорії та практики.	3	1
Тема 2. Основні поняття КФХА. Метод сталої іонної сили. Концентраційні, змішані та термодинамічні константи рівноваги.	3	1
Тема 3. Термодинамічні основи застосування КФХА для вивчення процесів у гетерогенних системах. Поняття сорбція, сорбтив, сорбат, адсорбція, ізотерма сорбції, термодинамічні характеристики адсорбційних рівноваг. Коефіцієнт розподілу. Експериментальне вимірювання ізотерм адсорбції компонентів розчинів. Вимірювання ізотерм адсорбції у статичному режимі. Метод окремих наважок та умови виконання експерименту. Вимірювання ізотерм адсорбції в динамічному режимі.	3	1
Тема 4. Засади планування експерименту з визначення констант рівноваги. Характеристика експериментальних методів. Приклади вдалих і невдалих планів експерименту.	3	1
Тема 5. Вимірювання ізотерм адсорбції та розподілу компонентів розчинів. Вимірювання ізотерм у статичному режимі. Метод окремих наважок та умови виконання експерименту. Вимірювання ізотерм в динамічному режимі.	3	1
Тема 6. Визначення складу комплексів графічними методами. Метод насичення. Метод Остромисленського-Жоба. Метод Б'єррума.	3	1
Тема 7. Визначення констант стійкості комплексів дослідженням допоміжних функцій. Метод напівцілих значень функції утворення. Метод Скетчарда. Методи, основані на лінеаризації рівняння ізотерми Ленгмюра. Опрацювання експериментальних даних в пакетах Excel, Origin.	3	1
Тема 8. Кооперативні взаємодії при зв'язуванні лігандів функціоналізованими матеріалами. Причини кооперативних ефектів, засоби їх виявлення та кількісного врахування. Модель полідентатного зв'язування та принципи її параметричної ідентифікації.	3	2
Тема 9. Основи комп'ютерного визначення параметрів моделей комплексоутворення. Визначення критерію збіжності моделі з експериментом. Призначення статистичних ваг. Методи мінімізації критеріальної функції (нульового, першого, другого та псевдодругого порядків). Боротьба з надлишковістю моделей. Аналіз адекватності моделі за допомогою глобальних і локальних критеріїв. Методи верифікації моделей.	3	2
Тема 10. Використання програми CLINP для параметричної ідентифікації моделей рівноваг у розчинах за даними методів рН-метрії, спектрофотометрії, розчинності, розподілу.	4	2
Тема 11. Використання програми CLINP для параметричної ідентифікації моделей рівноваг сорбції, іонного обміну на поверхні функціоналізованих матеріалів.	4	2
Тема 12. Характеристика відомостей про особливості процесів	3	2

комплексоутворення на поверхні функціоналізованих матеріалів за даними КФХА.		
Тема 13 Оцінювання енергетичної неоднорідності поверхонь за даними адсорбційних експериментів. Програма CAS.	3	2
Тема 14. Зважування на напівмікротерезах ВЛМ-1.	2	1
Тема 15. Мікрометоди очистки речовин (мікроперегонка, мікроперекристалізація з використанням ампули, висушування речовин, визначення температури кипіння).	4	3
Тема 16. Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.	4	3
Тема 17. Хроматографічні методи аналізу.	5	3
Тема 18. Вимірювання ізотерм адсорбції.	8	3
Тема 19. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.	8	3
Тема 20. Кислотно-основні властивості поліелектролітів. Визначення констант кислотної дисоціації катіонітів.	10	3

### 7. Методи навчання

Лекції, виконання лабораторних робіт, самостійна робота, виконання розрахункових завдань на комп'ютері.

### 8. Методи контролю

Складання колоквиумів за темами лабораторних робіт, залік, екзамен.

### 9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота								Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1	Модуль 2							40	100
Теми 1-13	T14	T15	T16	T17	T18	T19	T20		
	4	4	4	5	7	8	8		
	письмовий колоквиум: 10				письмовий колоквиум: 10				

Для зарахування модуля 2 студент має набрати не менше, ніж 50% балів за кожною з тем 14-20. Для одержання заліку і допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен виконати всі лабораторні роботи, скласти колоквиуми і набрати не менше 30 балів.

### Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	<b>A</b>	відмінно
80-89	<b>B</b>	добре
70-79	<b>C</b>	
60-69	<b>D</b>	задовільно
50-59	<b>E</b>	
1-49	<b>FX</b>	незадовільно

## 10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Документація до програмного забезпечення.
4. Описи лабораторних робіт.

## 11. Рекомендована література

### Базова

1. Холин Ю.В. Количественный физико-химический анализ комплексообразования в растворах и на поверхности химически модифицированных кремнеземов: содержательные модели, математические методы и их приложения. – Харьков: *Фолио*, 2000. – 288 с.
2. Холін Ю.В. Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення у гетерогенних системах. Навч. посібник для студентів хімічного факультету. – Харків: ХНУ, 2002. – 38 с.

### Допоміжна

1. Бек М., Надьпал И. Исследование комплексообразования новейшими методами: Пер. с англ. – М.: *Мир*, 1989. – 413 с.
2. Евсеев А.М., Николаева Л.С. Математическое моделирование химических равновесий. – М.: *Изд-во МГУ*, 1988. – 192 с.
3. Костромина Н.А., Кумок В.Н., Скорик Н.А. Химия координационных соединений. / Под. ред. Н.А. Костроминой. – М.: *Высшая школа*, 1990. – 432 с.
4. Лопаткин А.А. Теоретические основы физической адсорбции. – М.: *Изд-во МГУ*, 1983. – 344 с.
5. Россоти Ф., Россоти Х. Определение констант устойчивости и других констант равновесия в растворах: Пер. с англ. – М.: *Мир*, 1965. – 564 с.
6. Сапрыкова З.А., Боос Г.А., Захаров А.В. Физико-химические методы исследования координационных соединений в растворах. – Казань: *Изд-во Казанского ун-та*, 1988. – 192 с.
7. Хартли Ф., Бергес К., Оллок Р. Равновесия в растворах: Пер. с англ. – М.: *Мир*, 1983. – 360 с.
8. A.M.S. Lucho, A. Panteleimonov, Y.Kholin, Y. Gushikem. Simulation of adsorption equilibria on hybrid materials: Binding of metal chlorides with 3-*n*-propylpyridinium silsesquioxane chloride ion exchanger // *J. of Colloid and Interf. Sci.* – 2007. – V. 310. – P. 47-56.
9. Kholin Yu., Myerniy S. Energetic Heterogeneity of Sorbents: Numerical Calculation of Affinity Distributions // *Вісник Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна*. – 2004. – No 626. – Хімія. Вип. 11 (34). – С. 351-366.