

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної
роботи

_____ Антон ПАНТЕЛЕЙМОНОВ

“ _____ ” _____ 2020 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

КІЛЬКІСНИЙ ФІЗИКО-ХІМІЧНИЙ АНАЛІЗ КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ,
СОРБЦІЇ ТА ІОННОГО ОБМІНУ

рівень вищої освіти _____ магістр _____
галузь знань _____ 10 Природничі науки _____
спеціальність _____ 102 Хімія _____
освітня програма _____ освітня-професійна програма “Хімія” _____
вид дисципліни _____ за вибором _____
факультет _____ хімічний _____

2020 / 2021 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою факультету хімічного факультету

“ 27 ” серпня 2020 року, протокол № 8

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Холін Ю.В., доктор хім. наук, професор кафедри хімічного матеріалознавства;
Христенко І.В., кандидат хім. наук, доцент кафедри хімічного матеріалознавства;
Пантелеймонов А.В., кандидат хім. наук, доцент кафедри хімічного матеріалознавства

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол від “ 26 ” серпня 2020 року № 1

Завідувач кафедри хімічного матеріалознавства

(підпис) Олександр КОРОБОВ

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми “Хімія”

Гарант освітньо-професійної програми “Хімія”

(підпис) Андрій ДОРОШЕНКО

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “ 27 ” серпня 2020 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету

(підпис) Павло ЄФІМОВ

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексування, сорбції та іонного обміну” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки магістрів спеціальності (напряму) 102 хімія

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни: 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.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни: ознайомлення студентів із методом кількісного фізико-хімічного аналізу та його застосування для вивчення процесів у розчинах, сорбційних та іонообмінних системах.

1.3. Кількість кредитів 5

1.4. Загальна кількість годин 150

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
За вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	1-й
Семестр	
2-й	2-й
Лекції	
16 год.	6 год.
Практичні, семінарські заняття	
не передбачено	не передбачено
Лабораторні заняття	
32 год.	8 год.
Самостійна робота	
102 год.	136 год.
Індивідуальні завдання	
не передбачено	

1.6. Заплановані результати навчання

Знати та розуміти:

- 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 кількісного фізико-хімічного аналізу (КФХА) для дослідження рівноваг у системах різного типу;

- представляти навчальний матеріал і результати виконання експериментальних досліджень.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу

Тема 1. Засади кількісного фізико-хімічного аналізу(КФХА).

Історичні етапи розвитку КФХА. Основні поняття КФХА. Схема використання КФХА. Значущість результатів КФХА для хімічної теорії та практики. Метод сталої іонної сили. Концентраційні, змішані та термодинамічні константи рівноваги.

Тема 2. Термодинамічні основи застосування КФХА для вивчення процесів у гетерогенних системах.

Поняття сорбція, сорбтив, сорбат, адсорбція, ізотерма сорбції, термодинамічні характеристики адсорбційних рівноваг. Коефіцієнт розподілу. Метод Гібса. Метод шару кінцевої товщини. Моделі адсорбції. Адсорбція на поруватих тілах. Класифікація ізотерм сорбції.

Тема 3. Засади планування експерименту з визначення констант рівноваги. Характеристика експериментальних методів. Експериментальне вимірювання ізотерм адсорбції (в статичному та динамічному режимах) та іонного обміну.

Тема 4. Визначення складу комплексів графічними методами.

Метод насичення. Метод Остромисленського-Жоба. Метод Б'єррума.

Тема 5. Визначення констант стійкості комплексів дослідженням допоміжних функцій.

Метод напівцілих значень функції утворення. Метод Скетчарда. Методи, основані на лінеаризації рівняння ізотерми Ленгмюра.

Тема 6. Кооперативні взаємодії при зв'язуванні лігандів функціоналізованими матеріалами.

Причини кооперативних ефектів, засоби їх виявлення та кількісного врахування.

Тема 7. Модель полідентатного зв'язування та принципи її параметричної ідентифікації.

Передумови моделі. Приклади використання.

Тема 8. Параметрична ідентифікація моделей рівноваг. Основи комп'ютерного визначення параметрів моделей комплексоутворення. Параметрична ідентифікація моделей рівноваг за даними методів рН-метрії, спектрофотометрії, розчинності, розподілу між рідкими фазами, адсорбції, іонного обміну.

Визначення критерію збіжності моделі з експериментом. Призначення статистичних ваг. Методи мінімізації критеріальної функції. Боротьба з надлишкістю моделей. Аналіз адекватності моделі за допомогою глобальних і локальних критеріїв. Методи верифікації моделей.

Розділ 2. Лабораторні заняття

Тема 9. Мікрометоди аналізу і дослідження речовин і матеріалів (зважування на напівмікротерезах, мікроперегонка, мікроперекрystalізація з використанням ампули, висушування речовин, визначення температури кипіння).

Тема 10. Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.

Тема 11. Хроматографічні методи аналізу.

Тема 12. Вимірювання ізотерм адсорбції

Тема 13. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.

Тема 14. Кількісний фізико-хімічний аналіз рівноваг у розчинах барвників за даними спектрофотометрії.

Тема 15. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг за участю катіонітів.

Тема 16. Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення на поверхні аміновмісних органо-кремнеземних матеріалів.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу												
Разом за розділом 1	60	16				44	72	6				66
Розділ 2. Лабораторні заняття												
Разом за розділом 2	90			32		58	78			8		70
Усього годин	150	16		32		102	150	6		8		136

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна	заочна
1	Мікрометоди аналізу і дослідження речовин і матеріалів.	2	
2	Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.	2	
3	Хроматографічні методи аналізу.	4	2
4	Вимірювання ізотерм сорбції.	4	2
5	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.	4	2
6	Кількісний фізико-хімічний аналіз рівноваг у розчинах барвників за даними спектрофотометрії.	4	
7	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг за участю катіонів.	8	
8	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг на поверхні аміновмісних органо-кремнеземних матеріалів.	4	2
	Разом	32	8

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин	
		денна	заочна
1	Засади кількісного фізико-хімічного аналізу(КФХА).	2	5
2	Термодинамічні основи застосування КФХА для вивчення процесів у гетерогенних системах.	6	9
3	Засади планування експерименту з визначення констант рівноваги.	6	9
4	Визначення складу комплексів графічними методами.	12	16
5	Визначення констант стійкості комплексів дослідженням допоміжних функцій.	6	9
6	Кооперативні взаємодії при зв'язуванні лігандів функціоналізованими матеріалами.	5	9
7	Модель полідентатного зв'язування та принципи її параметричної ідентифікації.	5	9
8	Параметрична ідентифікація моделей рівноваг. Основи комп'ютерного визначення параметрів моделей комплексоутворення.	12	16
9	Мікрометоди аналізу і дослідження речовин і матеріалів.	4	4

10	Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.	4	4
11	Хроматографічні методи аналізу.	5	7
12	Вимірювання ізотерм сорбції.	6	7
13	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.	7	7
14	Кількісний фізико-хімічний аналіз рівноваг у розчинах барвників за даними спектрофотометрії.	8	7
15	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг за участю катіонів.	8	10
16	Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення на поверхні аміновмісних органо-кремнеземних матеріалів.	6	8
	Разом	102	136

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

7. Методи контролю

Поточний контроль на лекціях. Перевірка результатів виконання лабораторних робіт (оформлення звітів). Складання колоквиумів з виконаних лабораторних робіт. Семестровий екзамен (письмова робота).

8. Схема нарахування балів

Для зарахування модуля 2 студент має набрати не менше, ніж 50% балів за кожною з тем 9-16. Для одержання допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен виконати всі лабораторні роботи, скласти колоквиуми і набрати не менше 30 балів.

Поточний контроль, самостійна робота										Екзамен (письмова робота)	Сума
Розділ 1	Розділ 2							Склада- ння колок- віумів	Разом		
T1-T8	T9- T10	T11	T12	T13	T14	T15	T16				
5	4	4	5	5	5	6	6	20	60	40	100

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка для чотирирівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно
70 – 89	добре
50 – 69	задовільно
1 – 49	незадовільно

Критерії оцінювання навчальних досягнень студентів з дисципліни «Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення, сорбції та іонного обміну»

Знання студентів оцінюється за наступними критеріями:

– «відмінно» – студент міцно засвоїв теоретичний матеріал, здатен вирішувати розрахункові завдання; впевнено володіє статистичними та хемометричним засобами обробки даних хімічного експерименту; впевнено володіє засвоєним теоретичним

матеріалом при розв'язанні типових навчальних та наукових задач; здатен логічно проаналізувати одержані результати.

– «добре» – студент засвоїв теоретичний матеріал, здатен вирішувати розрахункові завдання та володіє основними статистичними та хемометричними засобами обробки результатів даних хімічного експерименту; здатен вирішувати типові навчальні задачі, але не впевнено вирішує наукові задачі або допускає неточності при аналізі одержаних результатів.

– «задовільно» – студент в основному засвоїв теоретичний матеріал, але не в повній мірі здатен використовувати засвоєний матеріал при вирішенні розрахункових завдань; невпевнено володіє основними засобами обробки даних хімічного експерименту за допомогою комп'ютерних технологій; не здатен логічно проаналізувати одержані результати.

– «незадовільно» – студент не засвоїв теоретичний матеріал, не орієнтується у більшості основних тем курсу, не здатен розв'язати типові навчальні задачі, не володіє засобами обробки даних хімічного експерименту за допомогою комп'ютерних технологій.

9. Рекомендована література

Основна література

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 література

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.
10. Kholin Y., Zaitsev V. Quantitative physicochemical analysis of equilibria on chemically modified silica surfaces // *Pure Appl. Chem.* – 2008. – V. 80, No. 7. – P. 1561-1592.

11. Физическая и коллоидная химия / К.И. Евстратова, Н.А. Купина, Е.Е. Малахова. - М.: Высшая школа, 1990 . - 487 с.
12. Адсорбция из растворов на поверхностях твердых тел: перевод с: англ. / Ч. Джайлс, Б. Инграм, Дж. Ключи и др.; Ред. Г. Парфит, К. Рочестер и В.И. Лыгин ; перевод Б.Н. Тарасевич . - М. : Мир, 1986 . - 488 с.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. Сайт кафедри хімічного матеріалознавства:
<http://chemo.univer.kharkov.ua/departement/kfha.htm>