

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Перший проректор

\_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Програма навчальної дисципліни

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

напрямок 040101 – „Хімія”

спеціальності 7.040101 – „Хімія”, 8.040101 – „Хімія”

спеціалізація „Дизайн матеріалів і хімічна інформатика”

факультет хімічний

2015 / 2016 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою хімічного факультету  
“27” серпня 2015 року, протокол № 7

Зі змінами та доповненнями затверджено Вченою радою хімічного факультету  
“25” вересня 2015 року, протокол № 8

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Холін Ю.В., доктор хім. наук, професор;  
Христенко І.В., кандидат хім. наук, доцент;  
Рошаль О.Д., кандидат хім. наук, доцент

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол від “26” серпня 2015 року № 1

Зі змінами та доповненнями програму схвалено на засіданні кафедри хімічного  
матеріалознавства

Протокол від “21” вересня 2015 року № 2

В.о. завідувача кафедри хімічного матеріалознавства

\_\_\_\_\_ Ю.В. Холін  
(підпис)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “24” вересня 2015 року № 2

Голова методичної комісії хімічного факультету

\_\_\_\_\_ Юрченко О.І.  
(підпис)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення, сорбції та іонного обміну” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки спеціалістів (спеціальність 7.040101 "Хімія", 8.040101 "Хімія") та магістрів (спеціальність 8.040101 "Хімія") напряму 040101 – хімія.

**Предметом** навчальної дисципліни є засоби, методичні та розрахункові принципи визначення фізико-хімічних параметрів реагентів у складних системах за залежностями „склад – властивість”.

### **Програма навчальної дисципліни складається з таких розділів:**

1. Мета та завдання навчальної дисципліни.
2. Опис навчальної дисципліни.
3. Виклад змісту навчальної дисципліни.
4. Структура навчальної дисципліни.
5. Теми лабораторних занять.
6. Самостійна робота.
7. Індивідуальні завдання.
8. Методи навчання.
9. Методи контролю.
10. Розподіл балів, які отримують студенти.
11. Методичне забезпечення.
12. Додаток.

### **1. Мета та завдання 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. Основними завданнями вивчення дисципліни є ознайомлення студентів із методом кількісного фізико-хімічного аналізу та його застосування для вивчення процесів у розчинах, сорбційних та іонообмінних системах.

1.3. Студенти повинні досягти таких результатів 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;
- вербально та невербально представляти навчальний матеріал і результати виконання лабораторних робіт.

## 2. Опис навчальної дисципліни

Найменування показника	Галузь знань (предметна область), напрям, спеціальність, рівень вищої освіти / освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	
Кількість кредитів 7	Галузь знань (предметна область) <u>0401 «Природничі науки»</u>	Вибіркова	
Індивідуальне завдання	Напрям: <u>040101 – «Хімія»</u>	Рік підготовки 5-й	
		Семестр	
Загальна кількість годин 210	Спеціальність: <u>8.070301 «Хімія»</u> , <u>7.070301 «Хімія»</u>	9-й	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних: лекції – 2; лабораторні заняття – 2, самостійної роботи студента – 7,7.	Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) <u>магістр, спеціаліст</u>	Лекції 36 год.	
		Лабораторні заняття 36 год.	
		Самостійна робота 138 год.	
		Індивідуальні завдання: год.	
		Вид контролю:	
		підсумковий семестровий контроль: екзамен	

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи для денної форми навчання становить 34%,

## 3. Виклад змісту навчальної дисципліни

### Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу

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

Тема 3. Засади планування експерименту з визначення констант рівноваги. Характеристика експериментальних методів. Приклади вдалих і невдалих планів експерименту. Експериментальне вимірювання ізотерм адсорбції 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.

Тема 8. Основи комп'ютерного визначення параметрів моделей комплексоутворення. 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.

Тема 9. Параметрична ідентифікація моделей рівноваг за даними методів рН-метрії, спектрофотометрії, розчинності, розподілу між рідкими фазами, адсорбції, іонного обміну.

Тема 10. Філософія та стратегія «конструювання» флуоресцентних зондів різноманітного призначення. Типи аналітичних сигналів від флуоресцентних зондів. Раціоетричні зонди.

Тема 11. Люмінесцентне зондування полярності середовища. Кислотно-основні флуоресцентні зонди. В'язкісні зонди. Зонди для оцінки поверхневого потенціалу мембран. Хемілюмінесцентні зонди.

Тема 12. Класифікація по типу електронного стану. Класифікація по механізму збудження. Електролюмінесценція. Електрофлуоресценція неорганічних матеріалів. Механізми хемілюмінесценції. Математичні моделі хемілюмінесценції.

Тема 13. Основні фотохімічні закони. Зворотні та незворотні фотореакції. Фотоперенос протона і кислотно-основні перетворення. Фотодисоціація і фотопротонування. Рівноважні процеси у збудженому стані. Перенос електронів при збудженні, окислювально-відновні фотореакції. Реакції комплексоутворення у збудженому стані.

## Розділ 2. Лабораторні заняття

Тема 14. Мікрометоди аналізу і дослідження речовин і матеріалів (зважування на напівмікротерезах, мікроперегонка, мікроперекристалізація з використанням ампули, висушування речовин, визначення температури кипіння).

Тема 15. Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.

Тема 16. Хроматографічні методи аналізу.

Тема 17. Вимірювання ізотерм адсорбції

Тема 18. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.

Тема 19. Кількісний фізико-хімічний аналіз рівноваг у розчинах барвників за даними спектрофотометрії.

Тема 20. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг за участю катіонітів.

Тема 21. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг на поверхні аміновмісних органо-кремнеземних матеріалів.

## 4. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	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											
Тема 1. Мета і засади кількісного фізико-хімічного аналізу. Історичні етапи розвитку КФХА. Значущість результатів КФХА для хімічної теорії та практики. Основні поняття КФХА. Метод сталої іонної сили. Концентраційні, змішані та термодинамічні константи рівноваги.	6	2				4					
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.	6	2				4					
Тема 3. Засади планування експерименту з визначення констант рівноваги. Характеристика експериментальних методів. Приклади вдалих і невдалих планів експерименту. Експериментальне вимірювання ізотерм адсорбції та іонного обміну.	6	2				4					
Тема 4. Визначення складу комплексів графічними методами. Метод насичення. Метод Остромисленського-Жоба. Метод Б'єррума.	12	4				8					
Тема 5. Визначення констант стійкості комплексів дослідженням допоміжних функцій. Метод напівцілих	6	2				4					

значень функції утворення. Метод Скетчарда. Методи, оснований на лінеаризації рівняння ізотерми Ленгмюра.												
Тема 6. Кооперативні взаємодії при зв'язуванні лігандів функціоналізованими матеріалами. Причини кооперативних ефектів, засоби їх виявлення та кількісного врахування.	6	2			4							
Тема 7. Модель полідентатного зв'язування та принципи її параметричної ідентифікації.	6	2			4							
Тема 8. Основи комп'ютерного визначення параметрів моделей комплексоутворення. Визначення критерію збіжності моделі з експериментом. Призначення статистичних ваг. Методи мінімізації критеріальної функції. Боротьба з надлишківістю моделей. Аналіз адекватності моделі за допомогою глобальних і локальних критеріїв. Методи верифікації моделей.	12	4			8							
Тема 9. Параметрична ідентифікація моделей рівноваг за даними методів рН-метрії, спектрофотометрії, розчинності, розподілу між рідкими фазами, адсорбції, іонного обміну.	12	4			8							
Тема 10. Філософія та стратегія «конструювання» флуоресцентних зондів різноманітного призначення. Типи	8	2			6							

аналітичних сигналів від флуоресцентних зондів. Раціометричні зонди.												
Тема 11. Люмінесцентне зондування полярності середовища. Кисотно-основні флуоресцентні зонди. В'язкісні зонди. Зонди для оцінки поверхневого потенціалу мембран. Хемілюмінесцентні зонди.	10	4				6						
Тема 12. Класифікація по типу електронного стану. Класифікація по механізму збудження. Електролюмінесценція. Електрофлуоресценція неорганічних матеріалів. Механізми хемілюмінесценції. Математичні моделі хемілюмінесценції	10	3				7						
Тема 13. Основні фотохімічні закони. Зворотні та незворотні фотореакції. Фотоперенос протона і кислотно-основні перетворення. Фотодисоціація і фотопротонування. Рівноважні процеси у збудженому стані. Перенос електронів при збудженні, окислювально-відновні фотореакції. Реакції комплексоутворення у збудженому стані.	8	3				5						
Разом за розділом 1	108	36				72						
<b>Розділ 2. Лабораторні заняття</b>												
Тема 1. Мікрометоди аналізу і дослідження речовин і матеріалів.	6			2		4						
Тема 2. Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів	8			2		6						
Тема 3. Хроматографічні методи аналізу.	12			4		8						
Тема 4. Вимірювання ізотерм адсорбції.	14			6		8						



Тема 5. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.	14		4	10							
Тема 6. Кількісний фізико-хімічний аналіз рівноваг у розчинах барвників за даними спектрофотометрії.	14		4	10							
Тема 7. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг за участю катіонів.	20		8	12							
Тема 8. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг на поверхні аміновмісних органо-кремнеземних матеріалів	14		6	8							
Разом за розділом 1	102		36	66							
<b>Усього годин</b>	210	36	36	138							

### 5. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Мікрометоди аналізу і дослідження речовин і матеріалів (зважування на напівмікротерезах, мікроперегонка, мікроперекристалізація з використанням ампули, висушування речовин, визначення температури кипіння).	2
2	Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.	2
3	Хроматографічні методи аналізу.	4
4	Вимірювання ізотерм адсорбції	6
5	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.	4
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	6
	Разом	36

### 6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	Форма контролю
Тема 1.	4	Поточний контроль на лекціях.
Тема 2.	4	
Тема 3.	4	
Тема 4.	8	

Тема 5.	4	Семестровий екзамен (письмова робота).
Тема 6.	4	
Тема 7.	4	
Тема 8.	8	
Тема 9.	8	
Тема 10.	6	
Тема 11.	6	
Тема 12.	7	
Тема 13.	5	
Тема 14.	4	
Тема 15.	6	
Тема 16.	8	
Тема 17.	8	Складання колоквіумів
Тема 18.	10	
Тема 19.	10	
Тема 20.	12	
Тема 21.	8	
Разом		138

### 7. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

### 8. Методи навчання

Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота.

### 9. Методи контролю

Поточний контроль на лекціях. Складання колоквіумів з виконаних лабораторних робіт. Семестровий екзамен (письмова робота).

### 10. Розподіл балів, які отримують студенти

Виконання лабораторних робіт								Складання колоквіумів	Семестровий екзамен (письмова робота)	Сума
T14	T15	T16	T17	T18	T19	T20	T21			
3	3	4	5	5	5	5	5	25	40	100
60										

### Шкала оцінювання

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

### 11. Методичне забезпечення

- Програма навчальної дисципліни.
- Навчальні посібники, монографії, наукові статті.

- Документація до програмного забезпечення.
- Описи лабораторних робіт.
- Приклади екзаменаційних білетів.

#### **Базова 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.

#### **Додаткова література**

3. Бек М., Надьпал И. Исследование комплексообразования новейшими методами: Пер. с англ. – М.: *Мир*, 1989. – 413 с.
4. Евсеев А.М., Николаева Л.С. Математическое моделирование химических равновесий. – М.: *Изд-во МГУ*, 1988. – 192 с.
5. Костромина Н.А., Кумок В.Н., Скорик Н.А. Химия координационных соединений. / Под. ред. Н.А. Костроминой. – М.: *Высшая школа*, 1990. – 432 с.
6. Лопаткин А.А. Теоретические основы физической адсорбции. – М.: *Изд-во МГУ*, 1983. – 344 с.
7. Россоти Ф., Россоти Х. Определение констант устойчивости и других констант равновесия в растворах: Пер. с англ. – М.: *Мир*, 1965. – 564 с.
8. 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.
9. Хартли Ф., Бергес К., Оллок Р. Равновесия в растворах: Пер. с англ. – М.: *Мир*, 1983. – 360 с.
10. 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.
11. 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.