

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної роботи

“ _____ ” _____ 2017 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

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

спеціальність (напрямок) 102 Хімія

факультет хімічний

2017 / 2018 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою факультету хімічного факультету

“ 28 ” серпня 2017 року, протокол № 7

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 “28” серпня 2017 року № 1

В.о. завідувача кафедри хімічного матеріалознавства

_____ (підпис)

Коробов О.І.

_____ (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “ 28 ” серпня 2017 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету

_____ (підпис)

Єфімов П.В.

_____ (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення, сорбції та іонного обміну” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки магістрів спеціальності (напрямку) 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 7

1.4. Загальна кількість годин 210

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
За вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
5-й	5-й
Семестр	
10-й	10-й
Лекції	
32 год.	10 год.
Практичні, семінарські заняття	
не передбачено	не передбачено
Лабораторні заняття	
32 год.	10 год.
Самостійна робота	
146 год.	190 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;

- вербально та невербально представляти навчальний матеріал і результати виконання лабораторних робіт.

2. Тематичний план 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 надлишковістю моделей. Аналіз адекватності моделі за допомогою глобальних і локальних критеріїв. Методи верифікації моделей.

Тема 9. Параметрична ідентифікація моделей рівноваг.

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

Розділ 2. Лабораторні заняття

Тема 10. Мікрометоди аналізу і дослідження речовин і матеріалів (зважування на напівмікротерезах, мікроперегонка, мікроперекрystalізація з використанням ампули, висушування речовин, визначення температури кипіння).

Тема 11. Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.

Тема 12. Хроматографічні методи аналізу.

Тема 13. Вимірювання ізотерм адсорбції

Тема 14. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.

Тема 15. Кількісний фізико-хімічний аналіз рівноваг у розчинах барвників за даними спектрофотометрії.

Тема 16. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг за участю катіонітів.

Тема 17. Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг на поверхні аміновмісних орґано-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	122	32				90	128	10				118
Розділ 2. Лабораторні заняття												
Разом за розділом 2	88			32		56	82			10		72
Усього годин	210	32		32		146	210	10		10		190

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна	заочна
1	Мікрометоди аналізу і дослідження речовин і матеріалів.	2	1
2	Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.	2	1
3	Хроматографічні методи аналізу.	4	1
4	Вимірювання ізотерм сорбції.	4	2
5	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.	4	1
6	Кількісний фізико-хімічний аналіз рівноваг у розчинах барвників за даними спектрофотометрії.	4	2
7	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг за участю катіонів.	6	
8	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг на поверхні аміновмісних орґано-кремнеземних матеріалів.	6	2
	Разом	32	10

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин	
		денна	заочна
1	Мета і засади кількісного фізико-хімічного аналізу(КФХА).	7	7
2	Термодинамічні основи застосування КФХА для вивчення процесів у гетерогенних системах.	7	11
3	Засади планування експерименту з визначення констант рівноваги.	7	10
4	Визначення складу комплексів графічними методами.	15	18
5	Визначення констант стійкості комплексів дослідженням допоміжних функцій.	8	12
6	Кооперативні взаємодії при зв'язуванні лігандів функціоналізованими матеріалами.	8	12

7	Модель полідентатного зв'язування та принципи її параметричної ідентифікації.	8	12
8	Основи комп'ютерного визначення параметрів моделей комплексоутворення.	15	18
9	Параметрична ідентифікація моделей рівноваг.	15	18
10	Мікрометоди аналізу і дослідження речовин і матеріалів.	3	4
11	Якісний елементний аналіз полімерних матеріалів.	5	6
12	Хроматографічні методи аналізу.	6	8
13	Вимірювання ізотерм сорбції.	8	10
14	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг гліцину за даними рН-метричного титрування.	8	10
15	Кількісний фізико-хімічний аналіз рівноваг у розчинах барвників за даними спектрофотометрії.	8	10
16	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг за участю катіонів.	10	14
17	Кількісний фізико-хімічний аналіз протолітичних рівноваг на поверхні аміновмісних органо-кремнеземних матеріалів.	8	10

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

7. Методи контролю

Поточний контроль на лекціях. 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 10-17. 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									Склада- ння колок- віумів	Разом	Екзамен (письмова робота)	Сума
Розділ 1	Розділ 2											
T1-T9	T10	T11	T12	T13	T14	T15	T16	T17				
	3	3	4	5	5	5	5	5	25	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

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

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.

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>