

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Проректор з науково-педагогічної  
роботи

\_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2019 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

2019 / 2020 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою факультету хімічного факультету

“ ” \_\_\_\_\_ 20 року, протокол № \_\_\_\_\_

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 “ ” \_\_\_\_\_ 20 року № \_\_\_\_\_

Завідувач кафедри хімічного матеріалознавства

\_\_\_\_\_ Коробов О.І.  
(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “ ” \_\_\_\_\_ 20 року № \_\_\_\_\_

Голова методичної комісії хімічного факультету

\_\_\_\_\_ Сфімов П.В.  
(підпис) (прізвище та ініціали)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення, 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.	8 год.
Практичні, семінарські заняття	
не передбачено	не передбачено
Лабораторні заняття	
32 год.	8 год.
Самостійна робота	
102 год.	134 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 надлишківістю 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
<b>Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу</b>												
Разом за розділом 1	60	16				44	72	8				64
<b>Розділ 2. Лабораторні заняття</b>												
Разом за розділом 2	90			32		58	78			8		70
<b>Усього годин</b>	150	16		32		102	150	8		8		134

### 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
	<b>Разом</b>	<b>32</b>	<b>8</b>

### 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	8
7	Модель полідентатного зв'язування та принципи її параметричної ідентифікації.	5	8
8	Параметрична ідентифікація моделей рівноваг. Основи	12	16

	комп'ютерного визначення параметрів моделей комплексоутворення.		
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
	<b>Разом</b>	<b>102</b>	<b>134</b>

### 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								Склада- ння колок- віумів	Разом	Екзамен (письмова робота)	Сума
Розділ 1	Розділ 2										
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 комплексобразования 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 комплексобразования 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. Клюни 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/departament/kfha.htm>