

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ.Н.С.КУРНАКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИОНХ РАН)

Рабочая программа дисциплины
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДОВ ХИМИЧЕСКОГО
АНАЛИЗА И ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ

Направление подготовки
04.06.01 – ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность (профиль) программы
Аналитическая химия

Квалификация (степень)
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Нормативный срок обучения – 4 года
Форма обучения – очная

Москва
2019 г

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Целью учебного курса «Теоретические основы методов химического анализа и исследования веществ и материалов» является расширение и углубление знаний аспирантами по вопросам теории и практики важнейших методов и средств аналитической химии.

Основными задачами изучения учебного курса является, с одной стороны, сформировать у аспирантов углубленные знания по методам анализа различных объектов, а с другой – одновременно привить им практические навыки анализа.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Настоящая дисциплина «Теоретические основы методов химического анализа и исследования веществ и материалов» входит в основную профессиональную образовательную программу высшего образования – программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия.

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)» и входит в вариативную часть в качестве дисциплины по выбору.

Настоящий курс охватывает почти все методы, средства и объекты химического анализа. В курсе рассматриваются как классические методы, так и новейшие методы, получившие уже широкое распространение. Исходя из современных представлений, обсуждаются теоретические основы и области практического применения методов определения как неорганических, так и органических соединений. Большое внимание уделено аппаратному оформлению существующих методов анализа и исследования различных веществ и материалов.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

Универсальные компетенции:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);

- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3).

Общепрофессиональные компетенции:

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

- готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);

- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

Профессиональные компетенции:

- способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.02 Аналитическая химия (ПК-1);

- владение методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-2).

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц (144 часов).

Дисциплина изучается на втором году обучения в аспирантуре. Дисциплина состоит из 7 разделов.

4.1 Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Все го	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц.	Лаб.	Прак	КСР.		
1.	Теоретические основы методов химического анализа и исследования веществ и материалов	144	57	17	40	-	-	87	кандидатский экзамен по специальности

4.2 Содержание дисциплины

4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел Дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа
		Лек.	Лаб.	Пр.	КСР	
1.	Химические методы. Гравиметрия и методы титрования.	3	6	-	-	13
2.	Кинетические методы	3	6	-	-	13
3.	Электрохимические методы	3	6	-	-	13
4.	Физические методы. Методы магнитного	2	6	-	-	12

	резонанса ядер и электронов.					
5.	Методы молекулярной оптической спектроскопии	2	6	-	-	12
6.	Методы масс-спектрометрии	2	5	-	-	12
7.	Автоматизация и миниатюризация методов анализа	2	5	-	-	12

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1.	Химические методы.	<p>Химические превращения вещества – основа химических методов. Использование законов термодинамики (химическое равновесие) и кинетики для описания и управления реальными гомогенными и гетерогенными системами.</p> <p>Количественные характеристики равновесий: термодинамическая и концентрационные константы, стандартный и формальный потенциалы, степень образования (мольная доля) компонента. Расчет активностей и равновесных концентраций компонентов (рН, рМ и концентрации разных комплексных форм, молекулярной и ионной растворимостей). Буферность систем (рН, рМ и редокс буферы).</p> <p>Развитие представлений о кислотах и основаниях. Константы кислотности и основности. Функция Гаммета. Буферные растворы.</p> <p>Комплексообразование. Типы комплексных соединений, используемых в химическом анализе. Комплексные соединения в растворе. Ступенчатое комплексообразование. Константы устойчивости. Методы определения состава комплексных соединений и расчета констант устойчивости. Кинетика реакций комплексообразования.</p> <p>Окислительно-восстановительное равновесие. Обратимые и необратимые реакции. Уравнение Нерста. Стандартные и реальные (формальные) потенциалы. Смешанный потенциал. Методы измерения потенциалов. Константы равновесия.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

		<p>Механизм окислительно-восстановительных реакций.</p> <p>Процессы осаждения-растворения. Равновесия в системе жидкость - твердая фаза. Константы равновесия (термодинамическое и реальное произведение растворимости); растворимость. Механизм образования и свойства кристаллических и аморфных осадков. Коллоидные системы. Загрязнения и условия получения чистых осадков. Условия полного осаждения и растворения осадков.</p> <p>Органические реагенты в химическом анализе. Функционально-аналитические группы. Важнейшие органические аналитические реагенты, области их применения.</p>	
2.	Гравиметрические и триметрические методы	<p>Гравиметрические методы. Сущность, значение, достоинства и ограничения прямых и косвенных гравиметрических методов. Требования, предъявляемые к осадкам. Важнейшие неорганические и органические осадители. Аналитические весы.</p> <p>Титриметрические методы. Сущность и классификация. Виды титрования (прямое, обратное, косвенное). Кривые титрования. Точка эквивалентности, конечная точка титрования и методы ее индикации.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
3.	Кинетические методы	<p>Сущность методов. Индикаторные реакции, индикаторные вещества. Дифференциальный и интегральный варианты методов. Каталитический и некаталитический варианты методов. Методы определения концентрации индикаторных веществ. Чувствительность, избирательность и точность, области применения.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
4.	Электрохимические методы	<p>Теоретические основы. Основные процессы, протекающие на электродах в электрохимической ячейке. Кинетика электрохимических процессов. Поляризационная кривая. Классификация электрохимических методов.</p> <p>Потенциометрия. Равновесные электрохимические системы и их характеристики. Использование прямых и косвенных потенциметрических методов в анализе и исследовании. Ионметрия, типы ионоселективных электродов и их</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

		<p>характеристики. Ферментные и газочувствительные электроды.</p> <p>Кулонометрия. Прямая потенциостатическая и гальваностатическая кулонометрия – безэталоный, высокочувствительный метод анализа. Кулонометрическое титрование, его возможности и преимущества перед другими титриметрическими методами.</p> <p>Вольтамперометрия.</p> <p>Характеристики вольтамперограмм, используемые для изучения и определения органических и неорганических соединений. Инверсионная вольтамперометрия и ее применение в анализе.</p> <p>Кондуктометрия. Эквивалентная и удельная электропроводность. Подвижность ионов. Низкочастотная кондуктометрия: прямой метод и кондуктометрическое титрование.</p> <p>Электрогравиметрия. Электролиз при контролируемом потенциале и при заданной величине тока. Применение электролиза для разделения компонентов смеси и их количественного определения.</p>	
5.	Физические методы	<p>Взаимодействие вещества с электромагнитным излучением, потоками частиц, магнитным полем – основа физических методов анализа.</p> <p>Методы атомной оптической спектроскопии. Атомные спектры эмиссии, поглощения и флуоресценции. Резонансное поглощение. Самопоглощение, ионизация. Аналитические линии. Аналитический сигнал.</p> <p>Атомно-эмиссионная спектроскопия. Возбуждение проб в пламени. Возбуждение в дуговом и искровом разрядах. Индуктивно связанная плазма. Фотографическая и фотоэлектрическая регистрация спектра. Компьютерная денситометрия. Оптические спектрометры, квантометры. Идентификация элементов по эмиссионным спектрам. Определение отдельных элементов. Физические и химические помехи. анализ твердых веществ и материалов, технологических растворов, других объектов.</p> <p>Атомно-абсорбционная спектрометрия. Сущность метода. Источники излучения (лампы с полым</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

		<p>катодом, безэлектрод-ные разрядные лампы, лазеры). Пламенная атомизация. Электротермическая атомизация. Помехи и их коррекция Примеры использования.</p> <p>Атомно-флуоресцентная спектроскопия. Принцип метода. Способы возбуждения атомов (УФ излучение, лазер). Взаимное влияние элементов и устранение этих влияний. Практическое применение.</p> <p>Методы рентгеновской и электронной спектроскопии. Основные свойства и характеристики рентгеновского излучения. Обозначения в рентгеновских спектрах. Правила отбора. Классификация эмиссион-ных методов РСА. Электронно-зондовый рентгеноспектральный микроанализ (РСМА), рентгенорадиометрический анализ (РРА), рентгеноспектральный анализ с ионным возбуждением (PIXE), рентгенофлуоресцент-ный анализ (РФА). Закон Мозли. Зависимость выхода рентгеновской флуоресценции от атомного номера элемента. Факторы, определяющие интенсивность флуоресценции. Качественный и количественный анализ. Матричные эффекты. Типы рентгеновских спектрометров. Спектрометры с энергетической и волновой дисперсией. Практическое применение.</p> <p>Абсорбционный рентгеноспектральный анализ. Принцип метода. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС; электронная спектроскопия для химического анализа, ЭСХА). Анализ поверхности. Практическое применение.</p> <p>Оже-электронная спектроскопия. Принцип метода. Зависимость энергии Оже-электронов от атомного номера элемента. Аналитические возможности и область применения.</p>	
6.	Методы молекулярной оптической спектроскопии	<p>Теоретические основы. Молекулярные спектры поглощения, испускания. Основные законы светопоглощения и испускания. Рассеяние света. Поляризация и оптическая активность. Способы измерения аналитического сигнала.</p> <p>Спектрофотометрия. Электронные спектры и энергетические</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

		<p>переходы в молекулах. Способы монохроматизации светового потока. Пути повышения избирательности определения. Способы определения концентрации веществ. Анализ многокомпонентных систем. Производная спектрофотометрия. Спектрофотометрическое титрование. Спектроскопия отражения. Достоинства и ограничения методов. Практическое применение.</p> <p>Люминесцентные методы. Виды люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Основные закономерности молекулярной люминесценции. Тушение люминесценции. Качественный и количественный анализ. Люминесценция кристаллофосфоров.</p> <p>ИК- и рамановская (комбинационного рассеяния) спектроскопия. Колебательные и вращательные спектры. Качественная интерпретация спектров и количественный анализ: идентификация веществ, структурно-групповой и молекулярный анализ, определение строения индивидуальных соединений. Особенности анализа газов, растворов и твердых образцов. Спектроскопия внутреннего отражения. Спектроскопия с нарушенным полным внутренним отражением. Поглощение в микроволновой области.</p>	
7.	Методы масс-спектрометрии	<p>Основные способы образования ионов: электронный удар, химическая ионизация, ионизация в поле, под действием излучения лазера, в индуктивно связанной плазме, тлеющем разряде, вакуумной искре и др. Способы масс-спектрального анализа, регистрация и интерпретация спектров. Качественный и количественный анализ. Анализ газообразных, жидких и твердых веществ.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
8.	Методы магнитного резонанса ядер и электронов	<p>Теоретические основы. Магнитно-дипольные переходы. Механизмы релаксации: спин-решеточная и спин-спиновая релаксация. Гиромагнитное отношение.</p> <p>ЯМР-спектроскопия: магнитный момент ядра и его взаимодействие с магнитным полем; реализация магнитного резонанса; химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие; применение для идентификации соединений.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

		ЭПР-спектроскопия: положение резонансного сигнала и g-фактора; электрон-ядерное, электрон-электронное взаимодействие и сверхтонкая структура спектра ЭПР; применение.	
9.	Автоматизация и миниатюризация методов анализа	Автоматизация лабораторного анализа и производственного контроля. Полная и частичная автоматизация. Автоматизация периодического, дискретного анализа и непрерывного анализа в потоке. Принципы применения и средства автоматизации. Автоматизированные приборы, системы и комплексы, автоматы-анализаторы для лабораторного и производственного анализа, роботы. Примеры современных высоко-эффективных аналитических приборов-автоматов (газоанализаторы, хромато-масс-спектрометры и другие спектрометры, автоматические приборы и системы для проточно-инжекционного анализа, для отбора и анализа проб космического вещества и др.).	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

5. Образовательные технологии

Основными образовательными технологиями, используемыми при реализации учебной работы, являются лекции ведущих отечественных и зарубежных ученых и консультации с преподавателями, проведение лабораторных работ в лаборатории, участие обучаемых в научной работе и выполнение исследовательских проектов.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Самостоятельная работа аспирантов предполагает проработку лекционного материала в читальном зале библиотеки, в лабораториях, с доступом к лабораторному оборудованию, приборам, базам данных, к ресурсам Интернет. Кроме того, аспирантам предлагается конспектирование и проработка материала научных докладов на заседаниях Ученого Совета ИОНХ РАН, его секций, диссертационных советов по специальности, участие в работе научных конференций и школ, работа в библиотеке и на сайтах электронных изданий.

Форма контроля знаний – экзамен в конце курса, включающий теоретические вопросы.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины аспиранты используют основную и дополнительную литературу, рекомендованную преподавателем. Кроме того, преподаватель может рекомендовать аспиранту ознакомиться с дополнительными материалами методического характера.

Название электронного или печатного ресурса (основная или дополнительная)	Тип	Кол-во экз.
Основная литература: Основы аналитической химии. В 2-х книгах. Под ред. Ю.А. Золотова. М.: Высшая школа, 2007. 461 с.	печ.	2
<i>Юинг Г.</i> Инструментальные методы химического анализа. Пер. с англ. М.: Мир, 1989.	печ.	1
<i>Форман Дж., Стокуэл П.</i> Автоматический химический анализ. Пер. с англ. М.: Мир, 1978.	печ.	1
<i>Галос З.</i> Электрохимические методы анализа. (пер. с англ). М.: Мир, 1974.	печ.	1
Аналитическая химия. Физические и физико-химические методы анализа. Под ред. О.М. Петрухина. М.: Химия, 2001.	печ.	2
Дополнительная литература: Практическое руководство по физико-химическим методам анализа / Под ред. И.П. Алимарина, В.М. Иванова. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987. 230 с.	печ.	2
<i>Терек Т., Мика Й., Гегуш Э.</i> Эмиссионный спектральный анализ. В 2-х частях. Пер. с англ. М.: Мир, 1982.	печ.	1
<i>Брицке М.Э.</i> Атомно-абсорбционный спектрохимический анализ. М.: Химия, 1982.	печ.	2
<i>Зайдель А.Н.</i> Атомно-флуоресцентный анализ. Л.: Химия, 1983.	печ.	3
Лазерная аналитическая спектроскопия. Под ред. Летохова В.С. М.: Наука, 1986.	печ.	2
<i>Головина А.П., Левшин Л.В.</i> Химический люминесцентный анализ неорганических веществ. М.: Химия, 1978.	печ.	4
<i>Бонд А.М.</i> Современные полярографические методы в аналитической химии. Пер. с англ. М.: Мир, 1984.	печ.	3
<i>Хмельницкий Р.А., Бродский Е.С.</i> Хромато-масс-спектрометрия. М.: Химия, 1983.	печ.	3
Внелабораторный химический анализ. Под ред. Ю.А. Золотова. М.: Наука, 2010.	печ.	2

Интернет-ресурсы:

1. E-library – российская научная электронная библиотека в области науки, технологии, медицины и образования;
2. Web of Science – база данных для поиска научной информации в области естественных, общественных, гуманитарных наук и искусства;
3. Scopus - библиографическая и реферативная база данных и инструмент для отслеживания цитируемости статей, опубликованных в научных изданиях;
4. Springer – научные и научно-популярные журналы.

Программное обеспечение:

- СИСТЕМНЫЕ ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА: Microsoft Windows;
- ПРИКЛАДНЫЕ ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА: Microsoft Office, Mozilla FireFox.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Институт общей и неорганической химии располагает материально-технической базой, соответствующей требованиям Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации).

Аудитории для проведения занятий оснащены компьютерами и проекторами для показа мультимедийных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.

Материально-техническая база соответствует действующим противопожарным правилам и нормам и обеспечивает проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работы аспирантов.

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных документов:

1. Федеральный закон «Об образовании в Российской Федерации» от 29.12.2012 г. № 273-ФЗ;
2. Приказ Минобрнауки России от 30 июля 2014 г. № 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)»;
3. Приказ Министерства образования и науки РФ от 19.11.2013 №1259 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)».

Автор(ы) программы:

Вед.н.с., д.х.н.



В.Б. Барановская