

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины
Избранные главы аналитической химии**

Направление подготовки
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Квалификация
Специалист

Форма обучения
Очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины: Б1.В.ДВ.1.2.7 «Избранные главы аналитической химии»

2. Цель изучения дисциплины – ознакомление с основными этапами развития аналитической химии, её современным состоянием, перспективами дальнейшего развития, а также с некоторыми высокочувствительными, специфическими методами определения, которые широко используются в анализе продукции химической промышленности, биологических и геологических объектов, в экологических и криминалистических исследованиях.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения – 5 курс, 9 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, 72 часа, из которых 32 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (24 часа – занятия лекционного типа, 8 часов – занятия практического типа) 40 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (в соответствии с картами компетенций)

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
Первый уровень (пороговый) (ОК–3) – I способность анализировать основные этапы и закономерности исторического развития общества для формирования гражданской позиции	З (ОК–3) – I – Знать: основные этапы развития отечественной аналитической химии, современное состояние и перспективы ее развития
Первый уровень (пороговый) (ПК–6) – I владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.	В (ПК–6) – I – Владеть: методами обработки и представления многомерных данных с использованием современного программного обеспечения
Второй уровень (углубленный) (СК–2) – II владение основами методов пробоотбора и пробоподготовки, идентификации и определения, математической статистики для обработки аналитической информации и умением их применять в анализе реальных объектов.	З (СК–2) – II – Знать: теоретические основы физических и физико-химических методов анализа веществ, принципы формирования аналитического сигнала У (СК–2) – II – Уметь: осуществлять расшифровку аналитического сигнала и интерпретировать полученную информацию о структуре и составе исследуемого объекта

6. Содержание дисциплины «Избранные главы аналитической химии» и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

№ п/п	Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
			Лекции	Семинары	
1	Основные этапы развития отечественной аналитической химии в XX веке	4	2		2
2	Аналитическая химия в Сибири, Томске, Томском университете	4	2		2
3	Современное состояние аналитической химии	4	2		2
4	Перспективы развития аналитической химии	4	2		2
5	ИК- и КР-спектроскопия, теоретические основы и практические аспекты применения.	10	2	2	6
6	Использование электронных пучков для анализа состава и структуры веществ	6	2		4
7	Сканирующая электронная микроскопия	4	2		2
8	Просвечивающая электронная микроскопия	4	2		2
9	Математизация и компьютеризация аналитической химии	4	2		2
10	Применение теории информации в аналитической химии	4	2		2
11	Математическое моделирование в аналитической химии	7	2	1	4
12	Обработка аналитических сигналов	6	2		4
13	Метод распознавания образов	7	2	1	4
14	Базы данных, системы поиска и искусственного интеллекта	4	2		2
	Всего	72	32		40

6.2. Программа дисциплины

Тема 1. Основные этапы развития отечественной аналитической химии в XX веке. Первые работы по аналитической химии (1913–1917 гг.). Создание первых научно-исследовательских институтов, разработка колориметрического, эмиссионного спектрального, радиохимического, электрохимических методов анализа (1917–1928 гг.). Развитие количественного анализа, появление экспресс-лабораторий, введение в вузах специальности «аналитическая химия» (1928–1941 гг.) Вклад Тананаева Н.А., Алимарина И.П., Бабко А.К. и других учёных в развитие аналитической химии. Достижения аналитической химии в послевоенные годы.

Тема 2. Аналитическая химия в Сибири, Томске, Томском университете. Первые печатные работы. Роль Петрашени В.И., Орловой М.П., Угольниковой Н.А. в развитии аналитической химии в ТГУ (1923–1960 гг.) Создание и развитие научных направлений кафедры аналитической химии под руководством Катаева Г.А. (1960–1981 гг.). Основные результаты работы кафедры за период с 1981 по 2006 гг. (заведующий кафедрой-Марьянов Б.М.). Научные направления работы кафедры в настоящее время (заведующий кафедрой Мокроусов Г.М.)

Тема 3. Современное состояние аналитической химии. Цели и задачи аналитической химии на современном этапе развития науки и техники. Её место среди химических наук, взаимосвязь с другими областями науки. Структура современной аналитической химии. Классификация и сравнительная характеристика методов аналитической химии. Основные требования к современным методам анализа: высокая точность, низкий предел обнаружения, экспрессность, избирательность, возможность автоматизации.

Тема 4. Перспективы развития аналитической химии. Создание и развитие высокоскоростных, дистанционных, локальных, неразрушающих, безэталонных методов анализа с использованием цифровых управляющих систем.

Тема 5. ИК- и КР-спектроскопия, теоретические основы и практические аспекты применения. Теоретические основы колебательной спектроскопии. Основные типы колебаний и соответствующие им области спектра. Основные элементы ИК-спектрометра, ИК-фурье спектрометр. Техника эксперимента. Спектроскопия диффузного отражения и нарушенного полного внутреннего отражения в ИК-области. Анализ ИК-спектров. Основы количественного и качественного анализа методом ИК-спектроскопии.

Основы эффекта комбинационного рассеяния. Устройство спектрометра КР. Применение метода КР. Определение структуры молекулы по данным ИК-спектроскопии и спектроскопии КР. Основы количественного анализа методом КР-спектроскопии.

Тема 6. Использование электронных пучков для анализа состава и структуры веществ. Свойства электронных пучков. Волновые свойства частиц. Гипотеза де Бройля. Дифракция электронов. Экспериментальные подтверждения гипотезы де Бройля, опыт Томсона. Применение микрочастиц для исследования структуры вещества. Источники и детекторы электронов. Магнитные фокусирующие линзы. Процессы, происходящие при воздействии электронов на вещество.

Тема 7. Сканирующая электронная микроскопия. Ограничения оптической микроскопии. Устройство и принцип действия сканирующего электронного микроскопа. Характеристики электронного пучка. Вторичная электронная эмиссия. Формирование изображения в первичных и вторичных электронах. Методы элементного анализа в СЭМ. Рентгенофлуоресцентный анализ в сканирующей микроскопии. Возможности современных приборов. Совместное использование электронного и ионного пучка. Низковакуумные микроскопы. Требования к образцам.

Тема 8. Просвечивающая электронная микроскопия. Устройство просвечивающего электронного микроскопа. Регистрация электронов и изображения. Вакуумная система. Единицы измерения вакуума. Разрешение в электронном микроскопе. Дифракция медленных электронов. Дифракция отраженных быстрых электронов.

Формирование дифракционной картины и изображений. Контраст в ПЭМ. Дифракция и микродифракция.

Тема 9. Математизация и компьютеризация аналитической химии. Хемометрика – новая поддисциплина аналитической химии, ее становление и развитие. Предмет и задачи хемометрики. Составные части и области приложения хемометрики.

Тема 10. Применение теории информации в аналитической химии. Трактовка информации. Неопределенность (энтропия). Уравнение Шеннона. Единица информации. Информативность аналитического метода.

Тема 11. Математическое моделирование в аналитической химии. Понятие модели. Формальное и теоретическое (физико-химическое) моделирование. Линейный регрессионный анализ. Функция регрессии. Постулаты линейного регрессионного анализа. Метод наименьших квадратов (МНК) при равноточных измерениях функции отклика. Метод НК в матричной форме. Метод определителей. Коридор погрешностей для линии регрессии. Коэффициент линейной корреляции. Формулы МНК для зависимости, исходящей из начала координат. Метод НК при неравноточных измерениях функции отклика (взвешенный МНК). Исключение «выскакивающей» точки. Оценка гипотезы линейности исследуемой зависимости. Двухфазная регрессия. Построение градуировочного графика. Процедуры МНК с нарушением постулатов регрессионного анализа. Фильтр Кальмана. Конфлюэнтный анализ. Феноменологическое моделирование. Метод максимума правдоподобия. Метод наименьших расстояний. Нелинейный МНК. Линеаризованный вариант МНК. Метод численного статистического моделирования (Монте-Карло). Нестатистический подход к интервальному оцениванию результатов измерений (метод центра неопределенности). Решение задач градуировки в Excel.

Тема 12. Обработка аналитических сигналов. Увеличение отношения «сигнал-шум». Усреднение сигнала. Модуляция сигнала. Фурье-преобразование. Преобразование формы сигнала. Нахождение кривой по точкам. Отделение сигнала от фона. Дифференцирование сигнала. Измерение площадей сигналов. Сглаживание данных. Блочное усреднение. Усреднение методом движущегося окна. Полиномиальное сглаживание методом НК. Сглаживание сплайн-функциями. Сглаживание Фурье-преобразованием. Дифференцирование сигнала. Разрешение сложных сигналов. Дифференцирование сигнала. Факторный анализ. Определение числа компонентов по рангу матрицы данных. Разрешение сложных сигналов методом математического моделирования. Профили Гаусса, Лоренца, Фойгта. Разрешение сигналов с помощью множественной регрессии. Развертывание налагающихся сигналов.

Тема 13. Метод распознавания образов. Кластерный анализ. Сбор данных, предварительная обработка. Трансляция, нормировка, масштабирование данных. Интервальное масштабное преобразование. Автомасштабное преобразование на единицу дисперсии.

Отбор полезной информации. Применение Фурье-преобразования. Факторный анализ. Статистическое взвешивание признаков по дисперсиям. Заполнение пустот баз данных. Классификация объектов. Геометрический подход. Мера подобия образа. Евклидово расстояние, манхэттенское расстояние, расстояние Чебышева. Представление данных в форме дендрограммы. Применение метода главных компонент в классификации, реализация в Excel. Метод ближайшего соседа. Метод наиболее удаленных соседей. Центроидный метод. Контролируемое обучение машин. Тренировочный ряд. Линейное обучающее устройство.

Тема 14. Базы данных, системы поиска и искусственного интеллекта. Базы данных. Данные, аналоговые и цифровые. Получение и хранение данных. Информация, ее отличие от данных. Информационно-поисковые системы. Системы искусственного интеллекта. Экспертные системы. Нейронные сети.

6.3. Форма промежуточной аттестации: зачет.

7. Ресурсное обеспечение дисциплины «Избранные главы аналитической химии»

7.1. Основная литература

1. Золотов Ю.А. История и методология аналитической химии/ Ю.А. Золотов, В.И. Вершинин. – М.: Академия, 2008. – 464 с.
2. Пентин Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии: учеб. пособие для вузов / Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина. – М.: Мир: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 398 с.
3. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Молекулярная спектроскопия / М.А. Ельяшевич. – М.: URSS: ЛИБРОКОМ, 2012. – 527 с.
4. Криштал М.М. Сканирующая электронная микроскопия и рентгено-спектральный микроанализ в примерах практического применения: учеб. пособие для вузов / М.М. Криштал [и др.]. – М.: Техносфера, 2009. – 206 с.
5. Померанцев А.Л. Хемометрика в Excel: Учеб. пособие / А.Л. Померанцев. – Томск: Из-во ТПУ, 2014. – 435 с.

7.2. Дополнительная литература

1. Кельнер Р. Аналитическая химия. Проблемы и подходы: уч. пособие в 2-х книгах / Р. Кельнер. – М.: Мир, 2013. – 1336 с.
2. Митова И.Я. История химии с древнейших времен до конца XX века: уч. пособие в 2-х томах. Т.1. / И.Я. Митова, А.М. Самойлов. – М.: ИД «Интеллект», 2012. – 624 с.
3. Родионова О.Е. Хемометрика: достижения и перспективы / О.Е. Родионова, А.Л. Померанцева // Успехи химии. – 2006. – Т. 75. – № 4. – С. 302–321.
4. ГОСТ Р 50.1.098-2014. Рекомендации по стандартизации. Статистические методы. Определение и использование линейных функций при калибровке.
5. ГОСТ Р 54500.3.1-2011 Неопределенность измерения. Часть 3. Руководство по выражению неопределенности измерения. Дополнение 1. Трансформирование распределений с использованием метода Монте-Карло.
6. Марьянов Б.М. Избранные главы хемометрики: Учеб. пособие для хим. фак. Вузов / Б.М. Марьянов. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2004. – 166 с.
7. Марьянов Б.М. Метод линеаризации в инструментальной титриметрии / Б.М. Марьянов. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2001. – 158 с.

7.3. Электронные ресурсы

1. Программа «Origin Pro 8» для статистической обработки результатов измерений, рекомендации к использованию программы на сайте: <http://www.OriginLab.com>
2. Золотов Ю.А. Введение в аналитическую химию [Электронный ресурс / Ю.А. Золотов. – Эл. изд. – Электрон. текстовые доп. (1 файл pdf: 266 с.).– М.: Лаборатория знаний: Лаборатория базовых знаний, 2016.
3. Шелковников В.В., Баталова В.Н., Киселева М.А., Отмахов В.И., Скворцова Л.Н., Зарубин А.Г. Физико-химические методы анализа. Учебно-методический комплекс (УМК). Томск, 2011. <http://edu.tsu.ru/eor/resource/557/tpl/index.html>.
4. Родионова О.Е. Хемометрика: достижения и перспективы / О.Е. Родионова, А.Л. Померанцева. Успехи химии. – 2006. – Т. 75. – № 4. – С. 302–321. http://rscs.chemometrics.ru/papers/UspKhim75_302.pdf.
5. Померанцев А.Л. Учебный курс по хемометрике / А.Л. Померанцев. – 2011 <http://rscs.chemometrics.ru/Tutorials/index.html>.
6. Р 50.1.098-2014. Рекомендации по стандартизации. Статистические методы. Определение и использование линейных функций при калибровке. <http://meganorm.ru/Index2/1/4293766/4293766466.htm>.

8. Преподаватели (авторы):

к.х.н., доцент Л.Б. Наумова, Л.Б.
к.х.н., доцент Т.И. Изаак
к.х.н., доцент А.Г. Зарубин

Авторы: к.х.н., доцент _____ Наумова Л.Б.
к.х.н., доцент _____ Изаак Т.И.
к.х.н., доцент _____ Зарубин А.Г.