

степени усложнения задач. В конце каждого раздела дается перечень вопросов, по которым можно судить о степени усвоения материала. Кроме того, по приведенному списку литературы после каждой из глав полученные знания могут быть существенно расширены.

Учебное пособие утверждено Научно-методическим советом Коми республиканской академии государственной службы и управления в качестве учебного пособия для студентов для студентов, обучающихся по специальности 032001 «Документоведение и документационное обеспечение управления»

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА

(учебное пособие)

Танганов Б.Б.

*Восточно-Сибирский государственный
технологический университет*

Улан-Удэ, Россия

В учебном пособии проф. Танганова Б.Б. «Физико-химические методы анализа» (Издательство Восточно-Сибирского государственного технологического университета.- Улан-Удэ, 2009.- 356 с.) рассмотрены теоретические положения физико-химических (инструментальных): оптических, электрохимических, хроматографических методов анализа и хемометрики, а также достижения и дальнейшие перспективы развития аналитической химии.

Рецензенты: Базарова Ж.Г., доктор химических наук, профессор Бурятского государственного университета, академик Тихоокеанской академии материалов, Анцупова Т.П., доктор биологических наук, профессор кафедры «Неорганическая и аналитическая химия» ВСГУТУ.

Работа является теоретической частью курса «Физико-химические методы анализа» и предназначена в качестве учебного пособия для студентов химико-технологических, технологических и экологических специальностей бакалавриата, специалитета и магистратуры.

Аналитическая химия – наука о принципах, методах и средствах определения химического состава и строения химических соединений, веществ и материалов.

Рассматриваемая дисциплина имеет мощный базис в виде практических и лабораторных работ по анализу и контролю множества реальных объектов, немислимых без теоретического обоснования и применения современных методик, реактивов, приборов и оборудования, химических и биосенсоров, микро-чипов, хемометрики.

В области аналитической химии наблюдается такой прогресс, что учебная литература по данной дисциплине практически не успевает за темпами ее развития. Выпуск новой литературы по обсуждаемой проблеме осуществляется ограниченными тиражами, недостаточно обеспечивающими многие высшие учебные заведения.

Сказанное подвигло автора не только попытаться восполнить дефицит учебно-методического материала в данной области знания, но и привлечь внимание читателей (студентов, аспирантов, преподавателей, а также научных работников) к тому, что аналитическая химия – это не только качественный и количественный макроанализ, но и методы анализа микро- и наноконцентраций анализируемого вещества в различных условиях. Представлена схема дальнейшего развития методов анализа с привлечением современных идей и новейших методик работы.

Так, развитие промышленности и науки потребовало от аналитической химии новых совершенных методов анализа. Возникла необходимость количественных определений примесей на уровне 10^{-6} ... 10^{-7} и ниже. Оказалось, например, что содержание так называемых запрещенных примесей (Cd, Pb и др.) в материалах ракетной техники должно быть не выше 10^{-5} %, содержание гафния в цирконии, используемом в качестве конструкционного материала в атомной технике, должно быть значительно меньше 0.01%. а в материалах полупроводниковой техники примеси должны составлять не более 10^{-7} %. Например известно, что полупроводниковые свойства германия обнаружили только после того, как были получены образцы этого элемента высокой степени чистоты. Цирконий был вначале забракован в качестве конструкционного материала в атомной промышленности на том основании, что сам быстро становился радиоактивным, хотя по теоретическим расчетам этого не должно было быть. Позднее выяснилось, что радиоактивным становился не цирконий, а обычный спутник циркония – гафний, находящийся в виде примеси в циркониевых материалах.

Определение примесей порядка 10^{-6} % и менее стало повседневной потребностью многих отраслей промышленности, поскольку от содержания примесей на этом уровне стало зависеть качество продукции. Эти сложные задачи были решены путем использования новых методов разделения, концентрирования и определения. Наибольшее практическое значение приобрели экстракционные, хроматографические, оптические и электрохимические

методы. Интенсивно развиваются в последнее время атомно-абсорбционная спектроскопия, рентгено-флуоресцентные и резонансные методы, кинетические методы анализа и некоторые другие. Современная аналитическая химия приобретает новые черты: она становится более экспрессной, точной, автоматизированной, способной проводить анализ без разрушения и на расстоянии.

Будущие наиболее перспективные пути развития науки «аналитическая химия» могут быть представлены в виде автоматизации и робототехники, истинно интеллектуальных приборов, микрочипов, сенсоров и миниатюризованных систем непрерывного действия, нанотрубок, модернизированных и усовершенствованных методов анализа дистанционного типа и т.д. Все это потребует новых концепций: более высокой чувствительности и селективности, более глубокого понимания и широкого применения метрологии, новых компьютерных технологий, прямого зондирования локализации энергии в молекулах, состояний переходов и реакционной динамики, тонкого трехмерного микро-, нано- и субповерхностного анализа и много другого. Новым является разработка авторских компьютерных программ по прикладным аспектам теории погрешностей эксперимента, для вычислений стандартных потенциалов, линейных и нелинейных калибровочных графиков в инструментальных методах анализа, для составления системы из n уравнений при многоуровневом моделировании оптических плотностей растворов в спектрофотометрии и других методах анализа.

Как и прежде, одно из важнейших направлений хемометрики – создание и применение математических методов анализа многокомпонентных систем в условиях наложения аналитических сигналов (включая и многомерную градуировку) или, говоря несколько условно, разделение сигналов вместо разделения веществ. При этом один и тот же алгоритм (с соответствующими изменениями) может быть применен, к примеру, как для разделения перекрывающихся хроматографических или вольт-амперометрических пиков, так и спектральных полос (перекрывающихся спектров абсорбции многокомпонентных смесей определяемых веществ) (компьютерные программы – Прил. 4, 5).

Еще одно важное направление развития современной хемометрики – построение и распознавание образов химических объектов, иными словами, их автоматическая классификация. В последнее время большее внимание стало уделяться первой, особенно трудно формализуемой части этой задачи – отбору как можно более информативных признаков для

построения наиболее эффективных классификационных моделей. Для этой цели используют методы и алгоритмы, традиционно используемые для решения других хемометрических задач, например дробный метод наименьших квадратов. Как методы многокомпонентного анализа, так и методы распознавания образов находят все большее применение в сферах, связанных с использованием химических сенсоров.

К проблемам, связанным с построением и распознаванием химических образов, тесно примыкает круг задач, связанных с установлением количественных соотношений между составом (или строением) и свойствами химических веществ, а также предсказания свойств по данным о составе и строению. Они имеют огромное значение для создания новых лекарственных средств, веществ и материалов с заданными свойствами (Глава 8, в частности раздел «8.6.4. Метод многоуровневого моделирования (МУМ)»).

Как правило, для решения подобных задач применяют современные методы многомерного регрессионного анализа – такие, как регрессия на главных компонентах, дробный метод наименьших квадратов, а также методы с использованием обучаемых нейронных сетей.

Учебное пособие содержит 356 страниц, в том числе 101 таблица, 30 рисунков, 5 компьютерных программ в виде отдельных приложений.

Книга может быть полезна преподавателям, аспирантам, магистрантам химических, химико-технологических и технологических специальностей ВУЗов, научным работникам академических институтов.

АТОМ. СТРОЕНИЕ И ДИНАМИКА (электронное издание)

Федорова Э.И., Цильке П.А.

Учебно-методическое электронное издание «Атом. Строение и динамика» предназначено для студентов химических и нехимических специальностей при изучении курса общей и неорганической химии. Рекомендуется использовать данную разработку на лекционных занятиях, демонстрируя ее с применением проекционной техники. Демонстрация моделей строения атомов, динамики перекрывания электронных орбиталей, динамики гибридизации электронных облаков, моделирования различных валентных возможностей атомов, позволяет представить изменение электронной плотности в пространстве между ядрами, что является единственным критерием