

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,

Акад. РАН, профессор



/С.Н.Калмыков/

«30» августа 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
направленной на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по специальности

Аналитическая химия

Analytical chemistry

(физико-математические науки)

Уровень высшего образования

Программа подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

Аналитическая химия (104-01-00-142-хн-фмн)

Москва 2022

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с Требованиями к основным программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, самостоятельно устанавливаемыми Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова (приказ №1216 от 24 ноября 2021 г.)

1. Краткая аннотация:

Название дисциплины – Аналитическая химия (*Analytical chemistry*)

Цель — подготовить аспирантов к сдаче экзамена кандидатского минимума по специальности, сформировать углубленные представления об основных принципах аналитической химии, положении и роли каждого метода в общем арсенале методов аналитической химии.

Задачи освоения дисциплины:

- 1) Формирование умения правильно выбирать методы анализа, отвечающие поставленной задаче.
- 2) Формирование знаний о современном состоянии и тенденциях развития аналитической науки и аналитической службы.
2. Уровень высшего образования – подготовка кадров высшей квалификации
3. Научная специальность: 1.4.2 Аналитическая химия, область науки: 1. Естественные науки, отрасль науки: физико-математические науки
4. Место дисциплины (модуля) в структуре Программы аспирантуры: Дисциплины (модули), направленные на подготовку к кандидатским экзаменам — курс по специальности (для сдачи канд. минимума), может быть прослушан аспирантами в качестве факультативного курса.
5. Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, *из которых 84 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (72 часа — занятия лекционного типа, 8 часов — групповые консультации, 4 часа — мероприятия промежуточной аттестации; 24 часа составляет самостоятельная работа обучающегося).*
6. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия: на предыдущих уровнях высшего образования должны быть освоены общие курсы:
 1. «Аналитическая химия»,
 2. «Неорганическая химия»,
 3. «Органическая химия»,
 4. «Физическая химия»,
 5. «Коллоидная химия»,
 6. «Квантовая химия»,
 7. «Математический анализ»,
 8. «Линейная алгебра»,
 9. «Теория вероятностей»,
 10. «Механика. Электричество»,
 11. «Колебания и волны. Оптика».

7. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам:

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (м»»одулю)	Всего, часы	В том числе						
		контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	
Раздел 1. Методология аналитической химии (пп. 1, 2, 4, 19 Паспорта специальности)	16	12	-	2	-	-	14	2
Раздел 2. Спектральные методы анализа. Атомная и молекулярная спектроскопия. Атомная и молекулярная масс-спектрометрия (п. 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19 Паспорта специальности)	28	20	-	2	-	-	22	6
Раздел 3. Хроматография. Электромиграционные методы и хромато-масс-спектрометрия (п. 2, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19 Паспорта специальности)	28	20	-	2	-	-	22	6
Раздел 4. Электрохимические методы анализа. Биохимические методы анализа. Сенсоры, биосенсоры и тест-методы (п. 2, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18 Паспорта специальности)	28	20	-	2	—	-	22	6
Промежуточная аттестация (<i>зачет</i>)	8	-	-	-	—	4	4	4
Итого	108	72	-	8	—	4	84	24

Содержание блоков

Раздел 1. Методология аналитической химии

1.1. Цели, задачи и особенности аналитической науки и аналитической службы

Теоретические основы химических, физических и физико-химических методов анализа. Химическая термодинамика и кинетика, дисперсные системы.

Взаимосвязь аналитической химии с другими науками, значение для общества (народное хозяйство, технологии, охрана окружающей среды, медицина, смежные области науки). Аналитическая химия и аналитическая служба. Аналитические задачи: обнаружение, идентификация, определение, тестирование веществ. Единство аналитического процесса. Диалектическая связь проблемы, метода, объекта анализа и определяемого компонента.

Основные характеристики методов определения: чувствительность, селективность, точность, прослеживаемость, экспрессность (продолжительность), трудоемкость, стоимость, приборное обеспечение, операционные расходы, экологическая безопасность (greenness). Метод, способ и методика. Методы обнаружения, идентификации, разделения и концентрирования, определения; гибридные и комбинированные методы. Методы прямые и косвенные. Классификации аналитических методов, условность классификаций. Принципы унификации и стандартизации аналитических методов.

Виды химического анализа: качественный, количественный, полуколичественный, экспрессный тест; изотопный, элементный, структурный, структурно-групповой (функциональный), молекулярный, вещественный, фазовый; органический, неорганический; макро-, микро-, ультрамикроанализ; локальный, микроскопический, неразрушающий, дистанционный, непрерывный, внелабораторный (полевой); целевой (таргетный, направленный), нецелевой (нетаргетный, ненаправленный).

Основные задачи анализа, аналитический цикл. Выбор метода и схемы анализа, отбор пробы, консервация пробы, подготовка пробы (разложение, разделение, концентрирование и другие операции), получение аналитической формы, измерение аналитического сигнала, обработка результатов измерений.

Тенденции развития аналитической химии: комбинированные, гибридные, мультиплексные методы, высокоинформативные и сверхвысокоинформативные методы, пути увеличения информативности методов; портативные аналитические устройства. Внедрение в аналитическую практику теории подобия (переход от химических, физических и физико-химических величин, определяющих исследуемую систему, к обобщённым величинам комплексного типа, составленным из исходных величин); определение суммарных и обобщенных показателей, распознавание образов.

Миниатюризация химического анализа, микроаналитическая химия. Наноаналитика, определение отдельных частиц и молекул, химический анализ отдельных клеток.

Сенсоры, скрининг, тест-методы; связь химического и биохимического анализа с клинической лабораторной диагностикой и тераностикой. Аналитический мониторинг, принципы, методы, организация, задачи.

1.2. Метрологические основы химического анализа и хемометрика

Химический анализ как метрологическая процедура. Результат анализа как случайная величина. Погрешности, способы их классификации, основные источники погрешностей в химическом анализе. Контрольный опыт.

Систематические погрешности в химическом анализе. Правильность и способы проверки правильности. Метод «введено–найдено». Постоянная (аддитивная) и пропорциональная

(мультипликативная) систематическая погрешность. Систематические погрешности I, II, III рода. Законы сложения погрешностей.

Случайные погрешности в химическом анализе. Генеральная и выборочная совокупности результатов химического анализа. Закон нормального распределения. Статистика малых выборок. Прецизионность, условия повторяемости и воспроизводимости. Статистические критерии: математическое ожидание (генеральное среднее) и генеральная дисперсия случайной величины, выборочное среднее, дисперсия, стандартное отклонение, доверительная вероятность и доверительный интервал. Характер связи между значением величины и ее стандартным отклонением (абсолютным и относительным). Возможные причины отклонения результатов анализа от нормального распределения. Распределение Пуассона. Проверка нормального закона распределения результатов анализа. Построение гистограмм распределения. Критерий Пирсона.

Статистическая обработка результатов серийных анализов. Выявление промахов. Контрольные карты. Законы распространения систематических и случайных погрешностей. Погрешности отдельных стадий анализа и конечного результата. Применение дисперсионного анализа для оценки погрешностей отдельных стадий и операций химического анализа.

Чувствительность химического анализа. Характеристики чувствительности. Предел обнаружения, предел определения (нижняя граница определяемых содержаний), их статистическая оценка. Пределы обнаружения и определения прибора и методики, их взаимосвязь. Линейный динамический диапазон метода. Пути повышения чувствительности.

Неопределенность измерений, связь с достоверностью измерений и концепцией точности измерений. Базовые понятия оценки неопределенности. Бюджет неопределенности, его расчет. Оценка неопределенности на основе модельного подхода и на основе данных прецизионности и правильности. Специфические вклады в неопределенность (примесные компоненты, градуировочная характеристика, пробоотбор).

Корреляции и генерализованный корреляционный анализ. Проверка значимости выборочного коэффициента корреляции. Использование корреляционного анализа для проверки независимости двух аналитических методик. Применение регрессионного анализа для построения градуировочных характеристик. Способы проверки адекватности регрессионной модели. Нахождение содержания вещества по градуировочной характеристике, статистическая оценка результата. Обработка нелинейных зависимостей в химическом анализе. Проблема выбора начальных приближений. Построение и использование нелинейных градуировочных зависимостей.

Аппроксимация экспериментальных зависимостей, ее основные разновидности. Дифференцирование и интегрирование экспериментальных данных. Фурье-преобразование, его использование для фильтрации шумов и снижения пределов обнаружения.

Математическое планирование и оптимизация аналитического эксперимента. Использование дисперсионного и многомерного регрессионного анализа в планировании эксперимента. Оценка значимости факторов. Планы второго порядка. Симплекс-оптимизация.

Метрологическое обеспечение контроля состава веществ и материалов. Стандартные образцы. Аттестация и стандартизация методик.

Компьютерные и расчетные методы в аналитической химии, хемометрика и хемоинформатика. Сбор, обработка, хранение и отображение результатов анализа, планирование и оптимизация экспериментов, управление аналитическими приборами,

создание интегрированных устройств. Предмет хемометрики, ее задачи. Полезная информация и шум. Многомерные данные в химическом анализе. Аналитический сигнал, аналитический признак, аналитическая позиция. Представление спектральных, хроматографических и других данных в векторной форме. Матрицы "объект-свойство". Программное обеспечение для работы с многомерными данными.

1.3. Пробоотбор и пробоподготовка

Представительность пробы; взаимосвязь с объектом и методом анализа. Генеральная, лабораторная и анализируемая пробы. Факторы, обуславливающие размер и способ отбора представительной пробы. Отбор пробы газов, жидкостей, твердых веществ. Отбор проб гомогенного и гетерогенного состава. Отбор токсичных и радиоактивных проб. Устройства, приемы и способы получения средней пробы твердых, жидких и газообразных веществ; токсичных и радиоактивных проб. Первичная обработка, хранение проб, транспортировка.

Способы разложения проб. Выбор способа разложения пробы с учетом природы (матрица и химический состав) объекта, цели и метода анализа. Растворение, термическое разложение, сплавление и спекание. Виды интенсификации пробоподготовки с использованием высокоактивных реагентов, повышенных температур, повышенного давления, излучений разного типа (ультразвукового, микроволнового, высокочастотного разряда), комбинирование различных приемов. Выделение и концентрирование органических соединений: экстракция по Сокслету, экстракция при повышенном давлении. Твердофазная экстракция. Приборы и устройства для пробоотбора и пробоподготовки; ультразвуковая пробоподготовка; автоклавы и микроволновая пробоподготовка; лазерный пробоотбор и пробоподготовка. Способы устранения и учета загрязнений и потерь компонентов при пробоподготовке.

1.4. Методы разделения и концентрирования

Аналитические технологии и методы разделения и концентрирования. Теоретические основы, процессы и реакции, лежащие в основе методов разделения и концентрирования. Термодинамические и кинетические характеристики разделения и концентрирования. Количественные показатели эффективности (коэффициент концентрирования, степень извлечения) и факторы, влияющие на них. Классификация методов по природе процессов, числу и природе фаз, природе матрицы и концентрата. Маскирование и демаскирование.

Принципы выбора метода разделения и концентрирования. Сочетание разделения и концентрирования с методами идентификации и определения. Основные методы концентрирования ионов металлов и органических соединений в природных и сточных водах, в почвах, воздухе, пищевых продуктах, биологических жидкостях. Основные методы концентрирования примесей в особо чистых веществах. Подходы и критерии выбора метода.

Классификация методов по природе процессов, числу и природе фаз, природе матрицы и концентрата: сорбционные методы, сорбенты; жидкостная и твердофазная экстракция, способы экстракции и классы экстрагентов, сверхкритическая флюидная экстракция; препаративная хроматография; осаждение и соосаждение; электрохимические методы разделения и концентрирования; фильтрация и ультрафильтрация, мембранные методы; фракционирование в потоке; центрифугирование и ультрацентрифугирование; испарение, сублимация и родственные методы; другие методы разделения и концентрирования. Сочетание разделения и концентрирования с методами идентификации и определения.

1.5. Основные объекты химического анализа и мониторинга

Таргетный (целевой) и нетаргетный (нецелевой) химический анализ. Неорганические и органические аналиты, группы методов анализа. Принципы и алгоритм выбора метода анализа для решения конкретной задачи.

Выбор метода химического анализа и схемы анализа, отбор пробы, консервация пробы, подготовка пробы (разложение, разделение, концентрирование и другие операции), получение аналитической формы, измерение аналитического сигнала, обработка результатов измерений. Взаимозаменяемость методов; оптимизация схемы анализа. Методы анализа на месте

Принципы, особенности пробоотбора и пробоподготовки, круг определяемых компонентов: геологические объекты, космические объекты; объекты окружающей среды (воздух, природные и сточные воды, почвы, донные отложения, флора), объекты экологического контроля, Экотоксиканты и суперэкотоксиканты. Геологические объекты. Неорганические соединения и материалы: металлы, сплавы и продукты металлургической промышленности, материалы атомной промышленности, промышленное сырье, природные материалы, другие промышленные материалы, композиционные и наноматериалы; вещества высокой чистоты. Органические вещества и материалы, нефть и нефтепродукты, полимерные материалы, биологически активные вещества, биологические и живые объекты, лекарственное сырье и фармацевтические препараты, медицинские объекты, объекты клинической лабораторной диагностики; объекты криминалистической экспертизы; пищевое сырье и продукты питания; промышленные, технологические и бытовые отходы; токсичные и радиоактивные, взрывчатые и легковоспламеняющиеся вещества, газы; археологические объекты и объекты культурного наследия.

Аналитический мониторинг, принципы, методы, организация, задачи.

Раздел 2. Спектральные методы анализа. Атомная и молекулярная спектроскопия. Атомная и молекулярная масс-спектрометрия

Взаимодействие вещества с электромагнитным излучением, потоками частиц, магнитным полем и аналитические методы на их основе. Место и роль спектроскопических и масс-спектрометрических методов в современных научных исследованиях, химическом анализе и контроле.

2.1. Атомная спектроскопия

Методы гамма, рентгеновской и электронной спектроскопии. Физические основы методов, их возможности и ограничения. Аналитический сигнал, качественный и количественный анализ. Аппаратная реализация методов. Техника эксперимента. Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Математическое моделирование спектров и алгоритмы обработки данных. Точность, чувствительность и избирательность, матричные эффекты, физические и химические помехи. Объекты и области рутинного и характерного применения. Принцип работы гамма-спектрометров. Деструктивный и недеструктивный гамма-активационный анализ. Способы идентификации и количественного определения элементов. Мессбауэровская спектроскопия, Параметры спектров. Химический сдвиг. Квадрупольное расщепление. Основные свойства и характеристики рентгеновского излучения; Спектры излучения, поглощения и флуоресценции и их связь со строением атома. Дифракция рентгеновских лучей. Рентгеноэмиссионный анализ, электронно-зондовый микроанализ, рентгеноабсорбционный анализ; рентгенофлуоресцентный анализ, микрорентгенофлуоресцентный анализ и рентгенофлуоресцентный анализ с полным внешним отражением; рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС; электронная спектроскопия для химического анализа); Оже-электронная спектроскопия; рентгеноспектральный микроанализ (РСМА) с электронным зондом; Аналитическая электронная микроскопия. Аналитическая зондовая микроскопия.

Оптическая атомная спектроскопия. Физические основы методов, их возможности и ограничения. Аналитический сигнал, качественный и количественный анализ. Аппаратная реализация методов. Техника эксперимента. Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Математическое моделирование спектров и алгоритмы обработки данных. Точность, чувствительность и избирательность, матричные эффекты, физические и химические помехи. Объекты и области рутинного и характерного применения. Принцип работы гамма-спектрометров. Атомные спектры эмиссии, поглощения и флуоресценции; резонансное поглощение; самопоглощение, ионизация. Аналитические линии атомов и ионов, термическое равновесие. Потенциалы и энергии атомизации, возбуждения и ионизации атом и атомных ионов, их взаимосвязь. Факторы, влияющие на ширину линии (эффект Доплера, ударное уширение, уширение Ван-дер-Ваальса). Атомно-эмиссионная спектроскопия, в пламени, дуговом и искровом разрядах, тлеющем разряде и плазме; индуктивно связанная плазма, микроволновая плазма. Регистрация спектров, матричные эффекты, физические и химические помехи; химические и инструментальные способы подготовки проб;. Атомно-абсорбционная спектроскопия, источники излучения (лампа с полым катодом, лазер, ксеноновая лампа, безэлектродная разрядная лампа), атомизаторы (пламенная атомизация, непламенные методы атомизации). Регистрация спектров, матричные эффекты, физические и химические помехи; химические и инструментальные способы подготовки проб.

2.2. Молекулярная спектроскопия

Общее для всех методов: Физические основы методов, их возможности и ограничения. Аналитический сигнал, аналитические полосы, качественный и количественный, функциональный и структурный анализ, применение в органическом и неорганическом анализе; идентификация компонентов, определение отдельных компонентов, многокомпонентный анализ. Аппаратная реализация методов. Техника эксперимента. Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Математическое моделирование спектров и алгоритмы обработки данных. Точность, чувствительность и избирательность. Матричные эффекты, физические и химические помехи; способы подготовки проб, особенности анализа газов, растворов и твердых образцов. Объекты и области рутинного и характерного применения.

Молекулярные спектры поглощения и испускания электромагнитного излучения; электронно-колебательно-вращательные (электронные), колебательно-вращательные (колебательные) и вращательные спектры. Квантово-механическое описание молекулярных ЭМИ спектров. Схемы электронных уровней молекулы. Электронные спектры и энергетические переходы в молекулах. Приближение Борна–Оппенгеймера. Связь химической структуры соединения с молекулярными спектрами. Молекулярные спектры поглощения, испускания. Основные законы светопоглощения и испускания. Светорассеяние. Рэлеевское рассеяние и рассеяние Тиндаля. Основные закономерности светорассеяния. Поляризация и оптическая активность. Дифференциальная спектроскопия; производная спектроскопия.

Аппаратура и материалы для молекулярной спектроскопии. Основные конструкционные узлы оптических приборов для оптической молекулярной спектроскопии. Источники излучения. Способы монохроматизации электромагнитного излучения, анализаторы частоты. Классификация спектральных приборов, их характеристики. Модульный принцип построения современного молекулярного спектрометра (УФ/видимая и ИК абсорбционная спектроскопия). Приемники излучения. Инструментальные помехи. Шумы и отношение сигнал-шум; оценка минимального аналитического сигнала. Способы измерения

аналитического сигнала. Выбор разрешающей способности прибора в зависимости от пробы и задач. Дифференциальная спектроскопия.

Пострегистрационная обработка спектров. Коррекция фона, сглаживание, усреднение спектров. Идентификация артефактов и их удаление. Преобразование спектров, математические операции со спектрами, нормирование. Автоматическая и ручная идентификация характеристических максимумов полос поглощения. Производные спектры, производная спектроскопия. Разложение спектров на компоненты. Методы анализа многокомпонентных смесей, налагаемые условия. Корреляционная спектроскопия.

Оптическая молекулярная спектроскопия. Физические основы методов, их возможности и ограничения. Аналитический сигнал, аналитические полосы, качественный и количественный, функциональный и структурный анализ, применение в органическом и неорганическом анализе; идентификация компонентов, определение отдельных компонентов, многокомпонентный анализ. Аппаратная реализация методов. Техника эксперимента. Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Математическое моделирование спектров и алгоритмы обработки данных. Точность, чувствительность и избирательность. Матричные эффекты, физические и химические помехи; способы подготовки проб, особенности анализа газов, растворов и твердых образцов. Объекты и области рутинного и характерного применения. Спектрофотометрия и другие методы молекулярной абсорбционной спектроскопии; спектроскопия отражения; фотоакустическая и фототермическая спектроскопия; нефелометрия и турбидиметрия; спектроскопия резонансного (упругого) молекулярного светорассеяния; динамическое светорассеяние и методы, включая комбинированные, на его основе. Люминесцентные методы; классификация методов по источнику; Двумерные спектры люминесценции; Синхронная фотофлуоресценция; тушение люминесценции, формула Штерна–Фольмера; концентрационное тушение и миграция энергии, теория резонансной миграции Фёрстера. Методы, основанные на поляризации флуоресценции. Хемилюминесцентные методы. Поляриметрия; дисперсия оптического вращения и круговой дихроизм и методы на их основе Основные принципы цветометрии (колориметрии). Абсорбционная и флуоресцентная микроскопия и микроспектроскопия.

Методы спектроскопии в ИК-области. Физические основы методов, их возможности и ограничения. Аналитический сигнал, аналитические полосы, качественный и количественный, функциональный и структурный анализ, применение в органическом и неорганическом анализе; идентификация компонентов, определение отдельных компонентов, многокомпонентный анализ. Аппаратная реализация методов. Техника эксперимента. Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Математическое моделирование спектров и алгоритмы обработки данных. Точность, чувствительность и избирательность. Матричные эффекты, физические и химические помехи; способы подготовки проб, особенности анализа газов, растворов и твердых образцов. Объекты и области рутинного и характерного применения. Колебательные и вращательные спектры. Качественная интерпретация спектров и количественный анализ: идентификация веществ, структурно-групповой и молекулярный анализ, определение строения индивидуальных соединений. Основные отличия от оптической спектроскопии. Принципы фурье-спектроскопии (интерферометрии), ее преимущества. ИК-абсорбционная спектроскопия. Спектроскопия диффузного отражения в ИК-области. ИК-спектроскопия с нарушенным полным внутренним отражением. ИК-микроскопия. Спектроскопия комбинационного рассеяния (рамановская спектроскопия), спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния и другие современные методы КР-спектроскопии, КР микроскопия и микроспектроскопия.

Методы магнитного резонанса ядер и электронов. Физические основы методов, их возможности и ограничения. Аналитический сигнал, аналитические полосы, качественный и количественный, функциональный и структурный анализ, применение в органическом и неорганическом анализе; идентификация компонентов, определение отдельных компонентов, многокомпонентный анализ. Аппаратная реализация методов. Техника эксперимента. Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Математическое моделирование спектров и алгоритмы обработки данных. Точность, чувствительность и избирательность. Матричные эффекты, физические и химические помехи; способы подготовки проб, особенности анализа газов, растворов и твердых образцов. Объекты и области рутинного и характерного применения. Магнитные моменты ядер и электронов. Магнитно-дипольные переходы. Поведение магнитно-активных частиц во внешнем магнитном поле. Квантово-механическое описание магнитного резонанса. Зеемановское расщепление уровней, Больцмановское распределение спинов ядер и электронов. Переходы между уровнями, условия ядерного магнитного и электронного парамагнитного резонанса. Механизмы релаксации: спин-решеточная и спин-спиновая релаксация. Гиромагнитное отношение. Основные уравнения. ЯМР-спектроскопия, Применение спектроскопии ЯМР ^1H . Количественный анализ смесей. Ядерный магнитный резонанс на тяжелых ядрах (^{13}C , ^{31}P , ^{19}F), отличия ЯМР на тяжелых ядрах от резонанса на ядрах ^1H . Двумерная ЯМР-спектроскопия. ЭПР-спектроскопия.

2.3. Атомная масс-спектрометрия

Физические основы методов, их возможности и ограничения. Математическое моделирование спектров и алгоритмы обработки данных. Основные способы образования атомных ионов: в индуктивно-связанной плазме, тлеющем разряде, вакуумной искре и др. Энергия ионизации. **Масс-спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-МС).** Возникновение плазмы, процессы в ИСП. Испарение, атомизация, ионизация пробы в индуктивно-связанной плазме. Основные конструкционные узлы масс-спектрометра с индуктивно-связанной плазмой. Система ввода пробы: назначение элементов и принцип выбора. Плазмовакuumный интерфейс. Вакуумные насосы. Масс-сепараторы: квадрупольный, магнитосекторный, времяпролетный. Детекторы. Масс-спектрометры с тройным квадруполем. ИСП-МС с лазерной абляцией. ИСП-МС в сочетании с газовой и жидкостной хроматографией. Анализ форм существования элементов. ИСП-МС единичных частиц. Изотопная масс-спектрометрия. Изотопное фракционирование, механизмы и практическое значение эффекта. Геохронология и изотопное профилирование. **Термоионизационная масс-спектрометрия.** Многоколлекторные магнитосекторные масс-спектрометры с ИСП. **Ускорительная масс-спектрометрия. Масс-спектрометрия тлеющего разряда.** Масс-спектрометрия вторичных ионов.

2.4. Молекулярная масс-спектрометрия

Физические основы методов, их возможности и ограничения. Математическое моделирование спектров и алгоритмы обработки данных. Основные способы образования молекулярных ионов: электронная ионизация, химическая ионизация, ионизация при атмосферном давлении (электрораспыление, химическая ионизация (APCI), фотоионизация), ионизация под действием излучения лазера. Методы фрагментации молекул. **Масс-спектрометрия низкого разрешения.** Источники ионизации, их характеристики и аппаратная реализация. Масс-сепараторы в масс-спектрометрах низкого разрешения: квадрупольные, линейные ионные ловушки, квадрупольные ионные ловушки. Масс-спектрометры с тройным квадруполем. Гибридные масс-спектрометры низкого разрешения. Вакуумные насосы. Детекторы в масс-спектрометрах низкого разрешения. Фрагментация молекул. Базы данных масс-спектров. Прямой ввод проб и сочетание **масс-спектрометрии низкого разрешения с хроматографией. Масс-спектрометрия высокого**

разрешения. Масс-сепараторы в масс-спектрометрах высокого разрешения: времяпролетные, орбитальные ионные ловушки, ячейки ионного циклотронного резонанса. Аппаратная реализация масс-спектрометров высокого разрешения. Обратное преобразование Фурье и его применение в масс-спектрометрах с орбитальной ловушкой ионов и ионного циклотронного резонанса. Гибридные масс-спектрометры высокого разрешения. Масс-спектрометры с разделением по ионной подвижности. Детекторы в масс-спектрометрах высокого разрешения. Фрагментация молекул. Базы данных масс-спектров и спектров фрагментации. Прямой ввод и сочетание с газовой и жидкостной хроматографией. Установление брутто-формулы и предположительной структуры молекул. Сочетание с ЯМР-спектроскопией. Профилирование примесей. Решение задач метаболомики и протеомики. Масс-спектрометрия в клинической лабораторной диагностике. Масс-спектрометрия больших молекул. Лазерная десорбция/ионизация в различных вариантах.

Раздел 3. Хроматография. Электромиграционные методы и хромато-масс-спектрометрия

Место и роль хроматографических методов в современных научных исследованиях, химическом анализе и контроле. Физические основы методов, их возможности и ограничения.

Основные понятия хроматографии. Теория равновесной хроматографии. Классификация хроматографических методов по применяемым фазам, механизмам разделения и технике эксперимента. Методы получения хроматограмм (фронтальная, элюентная и вытеснительная хроматография). Эффективность и селективность хроматографического разделения. Основные параметры удерживания веществ. Концепция теоретических тарелок и ее недостатки. Уравнение Ван Деемтера и уравнение Голея, основные факторы, влияющие на размывание пиков в колоночной хроматографии, в капиллярной газовой хроматографии, в ВЭЖХ и УВЭЖХ. Общие подходы к оптимизации процесса хроматографического разделения веществ. Способы осуществления хроматографического процесса. Особенности наполненных, капиллярных и PLOT-колонок. Способы элюирования веществ. Основные способы ввода пробы, комбинированные методы. Основные конструктивные узлы приборов для хроматографии. Сравнительная характеристика чувствительности и избирательности, областей применения основных хроматографических методов.

Хроматография в экологии. Современные способы хроматографического определения нормируемых и токсичных веществ в природных водах, почвах. Современные способы хроматографического определения нормируемых или токсичных веществ в воздухе. Современные способы хроматографического определения нормируемых или токсичных веществ в пищевых продуктах. Хроматография в медицинской химии. Современные способы хроматографического определения лекарственных препаратов, их метаболитов в организме человека и его биологических жидкостях. Современные способы хроматографического определения биомаркеров в организме человека и его биологических жидкостях. Проблемы хроматографического разделения стереоизомеров. Применение хиральной хроматографии в фармацевтике.

3.1. Газовая хроматография

Газоадсорбционная (газотвердофазная) хроматография. Особенности механизма удерживания и разделения компонентов. Характеристики неподвижных фаз (сорбентов) и подвижных фаз. Способы осуществления хроматографического процесса, условия проведения процесса разделения; детекторы; применение в органическом и неорганическом анализе. Техника эксперимента. Методические особенности эксперимента, стандартные образцы. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Точность, чувствительность и

избирательность, объекты и области рутинного и характерного применения. Изотермы адсорбции. Адсорбенты, газы-носители и требования к ним. Химическое и адсорбционное модифицирование поверхности адсорбента. Основные типы неподвижных фаз. Влияние температуры на удерживание и разделение. Газовая хроматография с программированным подъемом температуры. Принципы выбора начальной и конечной температуры и скорости нагрева. **Газожидкостная хроматография.** Требования к носителям и неподвижным жидким фазам. Основные типы неподвижных фаз. Проблемы деструкции неподвижных фаз при высокой температуре и пути ее устранения. Влияние природы жидкой фазы и разделяемых веществ на эффективность разделения. **Высокоэффективная капиллярная газовая хроматография.** Основные типы детекторов, их достоинства, недостатки и области применения. Требования к детекторам и их основные характеристики. Понятие о двумерной газовой хроматографии, ее достоинства и недостатки. **Сверхкритическая флюидная хроматография.** Особенности и отличия от газовой и жидкостной хроматографии. Основные типы подвижных фаз. Детекторы. Реакционная газовая хроматография и парофазный анализ.

3.2. Жидкостная хроматография

Высокоэффективная жидкостная хроматография. Особенности механизма удерживания и разделения компонентов. Характеристики неподвижных фаз (сорбентов) и подвижных фаз. Способы осуществления хроматографического процесса, условия проведения процесса разделения; детекторы; применение в органическом и неорганическом анализе. Техника эксперимента. Методические особенности эксперимента, стандартные образцы. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Точность, чувствительность и избирательность, объекты и области рутинного и характерного применения. Требования к неподвижной и подвижной фазам. Влияние природы и состава элюента на эффективность разделения. Элюирующая сила подвижных фаз. Влияние pH на удерживание веществ. Разновидности метода в зависимости от полярности неподвижной фазы: нормально-фазовый и обращенно-фазовый варианты. Понятие о хроматографии гидрофильных взаимодействий. Основные типы неподвижных фаз. Типы и варианты модифицированных силикагелей, их достоинства и недостатки. Принципы выбора условий разделения. Детекторы. **Ионообменная хроматография,** Неорганические и органические ионообменники и их свойства. Комплексообразующие ионообменники. Кинетика и селективность ионного обмена. Влияние природы и состава элюента на селективность разделения веществ. Концентрирование и разделение неорганических и органических ионов. **Ионная хроматография,** основные типы подвижных фаз, их особенности и области применения. Требования к сорбентам, их строение и классификация. Варианты ионной хроматографии с подавлением фоновой электропроводности и без нее. Типы устройств подавления электропроводности, их основные характеристики. Понятие о «безреагентной» хроматографии; **Ионпарная хроматография;** Основные модели (механизмы) удерживания. Роль неподвижной фазы и вводимого в элюент противоиона. Типы противоионов и закономерности удерживания веществ. Эксклюзионная хроматография, гель-хроматография (гельпроникающая и гельфилтрационная). Аффинная хроматография. **Хиральная хроматография. Тонкослойная (планарная) хроматография.** Способы получения планарных хроматограмм (восходящий, нисходящий, круговой, двумерный). Механизмы разделения. Сорбенты и подвижные фазы. Требования к проведению анализа и хранению пластин для анализа. Реагенты для проявления хроматограмм. Понятие о двумерной тонкослойной хроматографии. Особенности бумаги как неподвижной фазы.

3.3. Электромиграционные методы

Особенности механизма удерживания и разделения компонентов. Характеристики неподвижных фаз (сорбентов) и подвижных фаз. Способы осуществления

хроматографического процесса, условия проведения процесса разделения; детекторы; применение в органическом и неорганическом анализе. Техника эксперимента. Методические особенности эксперимента, стандартные образцы. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Точность, чувствительность и избирательность, объекты и области рутинного и характерного применения. Варианты электромиграционных методов: капиллярный зонный электрофорез; мицеллярная и микроэмульсионная электрокинетическая хроматография; капиллярный гель-электрофорез; изотахофорез; электрофокусирование в капиллярах. Причины высокой эффективности разделения. Аппаратная реализация, способы ввода пробы, особенности детектирования. Особенности механизма разделения молекул и типы подвижных фаз. Понятие о проведении электромиграционного анализа на микрочипе. Микрочиповые устройства для электрофореза; конструкция и материалы микрочипов для электрофореза

3.4. Хромато-масс-спектрометрия

Высокоинформативные и сверхинформативные методы химического анализа на основе жидкостной и газовой хроматографии в сочетании с оптической и масс-спектрометрией. Метод высокоэффективной жидкостной хроматографии–масс-спектрометрии. Метод капиллярной газовой хроматографии–масс-спектрометрии.

Раздел 4. Электрохимические методы анализа. Биохимические методы анализа. Сенсоры, биосенсоры и тест-методы

4.1. Основы электроаналитической химии

Проводники первого и второго рода, электрохимические ячейки. Фарадеевские и нефарадеевские процессы. Электрохимическая термодинамика. Электрохимический потенциал. Электродвижущая сила (ЭДС) реакции, ее связь со свободной энергией реакции. Электродный потенциал. Определение поляризации. Поляризуемая граница раздела фаз. Полу-реакции и восстановительные потенциалы. Измерение электродного потенциала. Уравнение Нернста. Формальные потенциалы. Теории строения двойного электрического слоя. Ток как кинетический параметр. Уравнение разряда обратимой реакции. Ток обмена. Уравнение разряда в отсутствие массопереноса. Ток обмена и электроды сравнения. Уравнение разряда при малых перенапряжениях. Двухэлектродная и трехэлектродная электрохимические ячейки. Общие уравнения массопереноса, уравнение Нернста–Планка. Диффузионные законы Фика. Общее решение уравнений диффузионных законов для связи тока с концентрацией. Стационарный ток и диффузионный слой Нернста. Понятие «обратимой электродной реакции». Электрохимическая гидродинамика.

4.2. основные электрохимические методы анализа

Стационарные электрохимические методы. Хроноамперометрия. Кулонометрия; Физические основы методов, их возможности и ограничения. Приборное обеспечение, техника измерений и способы измерения аналитического сигнала, аналитические особенности; качественный, количественный, функциональный и структурный анализ, применение в органическом и неорганическом анализе; идентификация компонентов, определение отдельных компонентов, многокомпонентный анализ; Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Точность, чувствительность и избирательность, объекты и области рутинного и характерного применения. Закон(ы) Фарадея. Кулонометрия как безэталонный метод анализа. Кондуктометрия; Эквивалентная и удельная электропроводность. Подвижность ионов. Низкочастотная кондуктометрия: прямой метод и кондуктометрическое титрование. Использование кондуктометрических датчиков в хроматографии и других методах анализа. Бесконтактная кондуктометрия. Кондуктометрия на нанопоре. Регистрация единичной

молекулы. **Полярография.** Уравнение Гейровского–Ильковича. Полярографические волны. Потенциал полуволны. Стационарные волны квазиобратимой и необратимой реакций. **Циклическая вольтамперометрия.** Физические основы методов, их возможности и ограничения. Приборное обеспечение, техника измерений и способы измерения аналитического сигнала, аналитические особенности; качественный, количественный, функциональный и структурный анализ, применение в органическом и неорганическом анализе; идентификация компонентов, определение отдельных компонентов, многокомпонентный анализ; Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Точность, чувствительность и избирательность, объекты и области рутинного и характерного применения. Линейная развертка потенциала и циклическая вольтамперометрия.

Скачок потенциала. **Хроноамперометрия** в случае планарной диффузии. Уравнение Котрелла. Временная функция падения емкостного тока. Поправка Лингана к уравнению Котрелла. Преимущества микроэлектродов по сравнению с обычными электродами (соотношение сигнал:шум и скорость). Электрохимическая микроскопия. **Хронопотенциометрия.** Уравнение Санда. Хронопотенциометрия в координатах производной времени по потенциалу от потенциала. **Импульсные методы.** Нормальная и дифференциальная импульсная вольтамперометрия. Формы задаваемого потенциала и моменты измерения тока. Квадратно-волновая вольтамперометрия. Форма задаваемого потенциала, параметры метода. Общее уравнение для тока. Квадратно-волновая вольтамперометрия обратимой реакции, выбор амплитуды. Квадратно-волновая вольтамперометрия необратимой и квазиобратимой реакций. Определение коэффициента диффузии деполяризатора и электрохимической константы. **Stripping (инверсионная) вольтамперометрия** Классическая анодная stripping вольтамперометрия. Адсорбционная stripping вольтамперометрия на примере детектирования иона алюминия в морской воде и одноцепочечной ДНК.

Импедансная спектроскопия. Физические основы методов, их возможности и ограничения. Приборное обеспечение, техника измерений и способы измерения аналитического сигнала, аналитические особенности; качественный, количественный, функциональный и структурный анализ, применение в органическом и неорганическом анализе; идентификация компонентов, определение отдельных компонентов, многокомпонентный анализ; Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Точность, чувствительность и избирательность, объекты и области рутинного и характерного применения. Форма задаваемого потенциала. Комплексная амплитуда. Импеданс стадии разряда (переноса заряда). Импеданс электродной реакции (Рендлса–Шевчика). Элемент постоянной фазы. Диффузионный импеданс (импеданс Варбурга).

Ионометрия. Физические основы методов, их возможности и ограничения. Приборное обеспечение, техника измерений и способы измерения аналитического сигнала, аналитические особенности; качественный, количественный, функциональный и структурный анализ, применение в органическом и неорганическом анализе; идентификация компонентов, определение отдельных компонентов, многокомпонентный анализ; Методические особенности эксперимента. Способы пробоотбора и пробоподготовки. Аналитическая информативность метода, обработка и интерпретация результатов. Точность, чувствительность и избирательность, объекты и области рутинного и характерного применения. Схема измерения. Измерительная ячейка. Природа трансмембранного потенциала: формальный вывод и движущая сила его возникновения. Основное свойство ионоселективной мембраны. Аналитический сигнал как функция активности. Уравнение Никольского–Эйзенмана. Принцип действия стеклянного рН

электрода. Мембранные электроды: состав, компоненты мембран их функции. Потенциометрический коэффициент селективности и способы его определения. Твердоконтактные ионоселективные электроды. Ионоселективный полевой транзистор (ISFET). Амперометрия неэлектроактивных ионов на границе раздела несмешивающихся жидкостей.

4.3. Биохимические методы анализа

Введение в биоаналитические методы и биосенсоры. Биомакромолекулы в аналитической химии. Каталитические и аффинные взаимодействия. Иммунизация биологических молекул. Ферментативные индикаторные реакции. Химическая природа и структура ферментов. Сущность иммунных методов. Аптасенсоры. ПЦР-анализ, полимеразная цепная реакция (ПЦР), принципы; Статические, микрочиповые и микрофлюидные устройства для полимеразной цепной реакции; конструкция и материалы микрочипов для ПЦР, достоинства и недостатки. Мультиплексная микродиагностика на основе биоузнавания. Экспресс-анализ олигонуклеотидов и ДНК на планарных микрофлюидных чипах. Сепарационные матрицы для разделения ДНК. ДНК-зонды.

4.4. Сенсоры, методы микроскопии, локального анализа и анализа поверхности в химическом анализе

Связь физических и химических сенсоров с информационными технологиями. Понятие сенсора и трансдюсера, другие основные понятия сенсоров. Основные требования, предъявляемые к методам анализа на основе сенсоров. Сенсоры для качественного и количественного анализа. Классификация сенсоров по принципу действия (химические, физические, физико-химические, биологические). Оптические (хемо- и биосенсоры), электрохимические, пьезоэлектрические (включая кварцевые микровесы), электрические сенсоры, термические, термометрические сенсоры; масс-сенсоры, микроэлектронные датчики для биомедицинских исследований. Мультиплексные сенсоры, наносенсорика. Связь с микрофлюидикой и автоматизацией анализа.

Место и роль методов микроскопии, локального анализа и анализа поверхности в современных научных исследованиях, химическом анализе и контроле. Сравнительная характеристика чувствительности и избирательности, областей применения основных методов микроскопии, локального анализа и анализа поверхности.

Биосенсоры. Схема биосенсора и принципа его действия. Требования к сенсорам и биосенсорам, их отличия от других аналитических устройств. Классификация биосенсоров. Способы «биоузнавания» и примеры биомолекул. Типы трансдюсеров. Кварцевые микровесы и поверхностный плазмонный резонанс. Ферментные электроды: три поколения биосенсоров. Потенциометрические биосенсоры и полевые транзисторы. Биосенсоры II поколения: глюкозооксидаза и персональные глюкозные тесты. Примеры медиаторных систем. Примеры коммерческого использования. Биосенсоры III поколения. Прямой биоэлектрокатализ. Пути повышения эффективности биоэлектрокатализа ферментами. Понятие о предельных эффективностях биоэлектрокатализа. Примеры включения целых клеток микроорганизмов в прямой биоэлектрокатализ. Преимущества и недостатки биоэлектрокатализа ферментами и целыми клетками с точки зрения практического использования.

Тест-методы. Основные требования, предъявляемые к тест-методам анализа. Качественный и полуколичественный анализ с помощью тест-устройств и экспресс-тестов. Классификация химических тестовых устройств: по типу индикаторной реакции, по способу регистрации сигнала, по способу оформления, по типу носителя по области применения. Аналитический сигнал в химических тест-методах. Кинетические методы анализа в тест-устройствах. Бумажные и тонкослойные тест-системы, их микрофлюидные варианты.

Биохимические тест-методы и тест-устройства. Классификация биохимических тестовых устройств: по типу индикаторной реакции, по биологическому компоненту, по способу оформления, по области применения. Способы иммобилизации биологического компонента; физическая и химическая иммобилизация.

Микроскопия в аналитической химии. Микроспектроскопия, физические основы методов, их возможности и ограничения методов. Основные конструктивные узлы оптических приборов для микроспектроскопии. Аппаратная реализация методов. Основные методы микроспектроскопии (абсорбционная, флуоресцентная, ИК-, резонансного рассеяния, КР-, фототермоакустическая). Методические особенности эксперимента. Точность, чувствительность и избирательность, объекты и области рутинного и характерного применения.

Физические основы, возможности и ограничения методов **дистанционного анализа**. Многоволновые, мультиспектральные, полноспектральные и гиперспектральные измерения в дистанционном анализе, связь объема информации и скорости ее получения. Аппаратная реализация методов. Основные методы, оптический и ИК-мониторинг. Источники излучения, корреляционные измерения. Дистанционное лазерное зондирование. Радарный и лидарный анализ. Мониторинг, связь дистанционного анализа с химико-аналитической сенсорикой.

8. Образовательные технологии

Проводятся традиционные лекции с использованием (там, где это требуется) мультимедийных презентаций.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю): аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

10. Ресурсное обеспечение:

Список основной литературы

1. Основы аналитической химии (в 2-х книгах). Под ред. Ю.А. Золотова. М.: Академия, 2014, 400 с.
2. Основы аналитической химии. Задачи и вопросы. Под ред. Ю.А. Золотова. М.: Высшая школа, 2020, 413 с.
3. Основы аналитической химии. Практическое руководство. Под ред. Ю.А. Золотова. М.: Высшая школа, 2018, 462 с.
4. Кристиан Г. Аналитическая химия. в 2 х т., пер. с англ., М. : Бином. Лаборатория Знаний, 2023. 1127 с.
5. Вершинин В.И., Евтюгин Г.А., Майстренко В.Н., Проскурнин М.А., Пупышев А.А., Шеховцова Т.Н. Аналитическая химия: дополнительные главы: учебное пособие (лекции по спецкурсу): в 2 ч., под. ред. В.И. Вершинина. Омск: Изд-во Омского университета. Ч. 1. 2018, 340 с.; ч. 2. 2019, 306 с.
6. Дворкин В.И. Метрология и обеспечение качества химического анализа. 2-е изд., М.: Техносфера, 2023. 318 с.
7. Гречников А.А., Грибов Л.А., Ефимова Ю.А. и др. Аналитическая химия. Под ред. А.А. Ищенко. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2019, 470 с.
8. Методы и достижения современной аналитической химии. Под ред. В.И. Вершинина, 2-е изд., СПб., М., Краснодар: Лань, 2021, 588 с.
9. Ганеев А.А., Зенкевич И.Г., Карцова Л.А., Москвин Л.Н., Родинков О.В. Аналитическая химия. Методы разделения веществ и гибридные методы анализа. 3-е изд., СПб., М., Краснодар: Лань, 2022, 332 с.
10. Аналитическая химия. Методы идентификации и определения веществ. под ред. Л.Н. Москвина, 4-е изд., СПб., М., Краснодар: Лань, 2022, 584 с.

11. Галль Л.Н. Физические основы масс-спектрометрии и ее применение в аналитике и биофизике СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010, 161 с.
12. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986.
13. Бёккер Ю. Хроматография. Инструментальная аналитика: методы хроматографии и капиллярного электрофореза. Пер. с нем. М.: Техносфера, 2023. 472 с.
14. Снайдер Л. Р., Киркленд Д.Д., Долан Д.У. Введение в современную жидкостную хроматографию. Пер. с англ. М.: Техносфера, 2020. 960 с.
15. Пупышев А.А., Суриков В.Т. Пупышев А.А., Суриков В.Т. Масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой. Образование ионов. 2-е издание, исправленное и дополненное. LAP GmBH & Co. KG, 2012. 389 с.
16. Экман Р., Зильберинг Е., Вестман-Бринкмальм Э., Край А. Масс-спектрометрия: аппаратура, толкование и приложения. М.: Техносфера, 2022, 368 с.
17. Ефимова А. И., Зайцев В. Б., Казанцев Д. В., Болдырев Н. Ю. Современная инфракрасная спектроскопия: основы, методы, приборная база: учебное пособие для вузов. СПб: Лань, 2023. 356 с.
18. Отто М. Современные методы аналитической химии, 5-е изд. М.: Техносфера, 2021, 656 с.
19. Карпов Ю. А., Савостин А. П. Методы пробоотбора и пробоподготовки: учебное пособие, 4-е изд. М.: Лаборатория знаний, 2020, 246 с.
20. Другов, Ю.С., Родин А.А. Пробоподготовка в экологическом анализе, 6-е изд., М.: Лаборатория знаний, 2020, 858 с.
21. Изотопная масс-спектрометрия легких газообразующих элементов. Под ред. В.С. Севастьянова; М.: Ин-т геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН. 2011, 240 с.
22. Внелабораторный химический анализ. Под ред. Ю.А. Золотова. М.: Наука, 2010. 564 с.
23. Пупышев А.А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ М.: Техносфера, 2009, 784 с.
24. Ганеев А.А., Шолупов С.Е., Пупышев А.А., Большаков А.А., Погарев С.Е. Атомно-абсорбционный анализ. Учебное пособие. СПб.: Лань, 2011. 304 с.
25. Метрологическая прослеживаемость в химических измерениях (под ред. Барановской В.Б., Болдырева И.В.) М.: Техносфера, 2022. 106 с.
26. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды М.: Техносфера, 2013, 632 с.
27. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. Изд. второе, переработанное и дополненное. М.: Техносфера, 2015, 704 с.
28. Лаваньини И., Маньо Ф., Сералья Р., Тральди П. Количественные методы в масс-спектрометрии М.: Техносфера, 2008. 176 с.
29. Криштал М. М., Ясников И. С., Полунин В. И., Филатов А. М., Ульяненок А. Г. Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный микроанализ М.: Техносфера 2009, 208 с.
30. Бёккер Ю. Спектроскопия. М.: Техносфера, 2009, 528 с.
31. Кельнер Р. Аналитическая химия. Проблемы и подходы. Пер. с англ. М: Мир, 2004, 608 с.
32. Юинг Г. Инструментальные методы химического анализа. Пер. с англ. М.: Мир, 1989.
33. Пупышев А.А., Данилова Д.А. Атомно-эмиссионный спектральный анализ с индуктивно связанной плазмой и тлеющим разрядом по Гримму. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2002. 202 с.
34. Эгертон Р.Ф. Физические принципы электронной микроскопии М.: Техносфера, 2010, 304 с.
35. Ревенко А.Г. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ природных материалов. Новосибирск: ВО Наука, 1994. 264 с.

36. Этчегоин П.Г., Ле Ру Э.К., Ванг Ю.. Поверхностно-усиленная рамановская спектроскопия SERS. М.: Техносфера. 2017. 332 с.
37. Дерффель К. Статистика в аналитической химии (пер. с нем.) М.: Мир. 1994.
38. Шараф М.А., Иллмен Л., Ковальски Б.Р. Хемометрика. пер. с англ. Л.: Химия. 1989.
39. Морф В. Принципы работы с ионоселективными электродами. М.: Мир, 1985.
40. Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. М.: Техносфера, 2009, 368 с.
41. Лёвшин Л.В., Салецкий А.М., Оптические методы исследования молекулярных систем. Молекулярная спектроскопия, М.: МГУ, 1994.
42. Бенуэлл К., Основы молекулярной спектроскопии М.: Мир, 1985.
43. Нолтинг Б. Новейшие методы исследования биосистем М.: Техносфера, 2005. 256 с.
44. Баника Ф.-Г.. Химические и биологические сенсоры. Основы и применения. М.: Техносфера. 2014. 880 с.
45. Тернер Э. Биосенсоры: Основы и приложения (пер. с англ.). М.: Мир. 1992.
46. Тельдешы Ю.. Радиоаналитическая химия. Пер. со словац. М.: Энергоатомиздат. 1987.
47. Сысоев А.А., Изотопная масс-спектрометрия, 1993.
48. Хенце Г. Полярография и вольтамперометрия. Теоретические основы и аналитическая практика. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. 284 с.
49. Комптон Р.Г., Бэнкс К.Е. Постигая вольтамперометрию. Пер. с англ.. Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2015. 509 с.
50. Macro, Micro, and Nano-Biosensors Potential Applications and Possible Limitations Springer International Publishing, 2021, 320 с
51. Карпов Ю.А., Савостин А.П., Глинская И.В. Методы пробоотбора и пробоподготовки. Курс лекций. Изд-во МИСиС. 2001.

Список дополнительной литературы

1. Петерс Д., Хайес Дж., Хифтье Г. Химическое разделение и измерение. Теория и практика аналитической химии. В двух книгах. М: Химия, 1978. 477, 338 с.
2. Бок Р. Методы разложения в аналитической химии (пер. с англ.) М.: Химия. 1984.
3. Апяри В.В., Дмитриенко С.Г., Горбунова М.В., Толмачева В.В., Фурлетов А.А. Методы выделения органических соединений из твердых М: Лика, 2024, 102 с.
4. Дмитриенко С.Г., Апяри В.В., Толмачева В.В., Горбунова М.В., Золотов Ю.А. Жидкофазное микроэкстракционное концентрирование органических соединений. М.: Наука. 2020. 133 с.
5. Лосев Н.Ф., Смагунова А.Н. Основы рентгено-спектрального флуоресцентного анализа М. Химия 1982.
6. Проблемы аналитической химии. Т. 12: Биохимические методы анализа (ферментативный анализ, биосенсоры, иммуноанализ). Под ред. Дзантиева Б.Б.. М.: Наука, 2010. 391 с.
7. Зенкевич И. Г., Ермаков С. С., Карцова Л. А. и др. Аналитическая химия. Химический анализ : учебник для вузов, 2-е изд., стер., СПб.: Лань, 2022, 444 с.
8. Долгоносков А.М., Рудаков О.Б., Прудковский А.Г. Колоночная аналитическая хроматография: практика, теория, моделирование. 3-е изд., СПб., М., Краснодар: Лань, 2022, 468 с.
9. Аналитический контроль благородных металлов. Под ред. Ю.А. Карпова, В.Б. Барановской, Л.П. Житенко, М.: Техносфера, 2019. 400 с.
10. Тахистов В.В., Пономарев Д.А. Органическая масс-спектрометрия. СПб.: ВВМ, 2005, 345 с.
11. Карпов Ю.А., Савостин А.П., Сальников В.Д Аналитический контроль в металлургическом производстве. М.: Академкнига, 2006, 352 с.
12. Цизин Г.И., Статкус М.А. Сорбционное концентрирование микроэлементов в динамических условиях. М.: ЛЕНАНД, 2016. 480 с.

13. Конюхов В. Ю. Хроматография: учебник. СПб.: Лань, 2012. 224 с.
14. Нестеренко П., Джонс Ф., Полл Б. Высокоэффективная комплексообразовательная хроматография ионов металлов. М.: Техносфера, 2013. 312 с.
15. Жуховицкий С. М. Яновский, И. А. Ревельский. Хромадистилляция и хроматография: монография. М.: Техносфера, 2021, 288 с.
16. Хенке Х. Жидкостная хроматография. М.: Техносфера, 2009, 264 с.
17. Сычев, С. Н. Высокоэффективная жидкостная хроматография: аналитика, физическая химия, распознавание многокомпонентных систем: учебное пособие СПб.: Лань, 2013, 256 с.
18. Майер В.Р. Практическая высокоэффективная жидкостная хроматография. 5-е изд., М.: Техносфера, 2019, 408 с.
19. Дятлов В.А., Серегина Т.С., Семикин В.В. Фурье ИК-спектроскопия многокомпонентных систем: учебно-методическое пособие. М.: РТУ МИРЭА, 2022, 79 с.
20. Барановская В.Б., Кошель Е.С. Дуговой атомно-эмиссионный анализ редкоземельных металлов и их оксидов М.: Техносфера, 2020. 132 с.
21. Купцов А.Х., Жижин Г.Н. Фурье-КР и Фурье-ИК спектры полимеров М.: Техносфера, 2013, 696 с.
22. Sensors for Environment, Health and Security. Advanced Materials and Technologies. под ред. М. I. Baraton, Springer Science, Business Media B.V., 2009, 501 с.
23. Кузьмин Н.М., Золотов Ю.А. Концентрирование следов элементов. М.: Наука, 1988.
24. Сабадвари Ф., Робинсон А. История аналитической химии. пер. с англ. М.: Мир, 1984.
25. Рамендик Г.И. Элементный масс-спектральный анализ твердых тел. М.: Химия. 1993.
26. Терек Т., Мика Й., Гегуш Э. Эмиссионный спектральный анализ. В 2-х частях, пер. с англ. М.: Мир. 1982.
27. Брицке М.Э. Атомно-абсорбционный спектрохимический анализ. М.: Химия. 1982.
28. Лазерная аналитическая спектроскопия. Под ред. Летохова В.С. М.: Наука. 1986.
29. Головина А.П., Левшин Л.В. Химический люминесцентный анализ неорганических веществ. М.: Химия, 1978.
30. Шпигун О.А., Золотов Ю.А. Ионная хроматография. М.: Изд-во МГУ. 1990.
31. Гольдберг К.А., Вигдергауз М.С. Введение в газовую хроматографию. М.: Химия. 1990.
32. Даванков В.А., Навратил Дж., Уолтон Х. Лигандообменная хроматография. М.: Мир, 1989.
33. Березкин В.Г., Бочков А.С. Количественная тонкослойная хроматография. Инструментальные методы. М.: Наука, 1980.
34. Макроциклические соединения в аналитической химии. Под ред. Золотова Ю.А. Кузьмина Н.М. М.: Наука, 1993.
35. Перес-Бендито Д., Сильва М. Кинетические методы в аналитической химии. М.: Мир, 1991.
36. Бонд А.М. Современные полярографические методы в аналитической химии. Пер. с англ. М.: Мир, 1984.
37. Никольский Б.П., Матерова Е.А. Ионоселективные электроды. Л.: Химия, 1980.
38. Иоффе Б.В., Зенкевич И.Г., Кузнецов М.А., Берштейн И.Я. Новые физико-химические методы исследования органических соединений. Л.: Изд-во ЛГУ, 1984.
39. Хмельницкий Р.А., Бродский Е.С. Хромато-масс-спектрометрия. М.: Химия, 1983.
40. Фелдман Л., Майер Д. Основы анализа поверхности и тонких пленок. М.: Мир, 1989.
41. Плинер Ю.Л., Кузьмин Н.М. Метрологические проблемы аналитического контроля качества металлопродукции. М.: Металлургия. 1989.
42. Карпов Ю.А., Гиммельфарб Ф.А., Савостин А.П., Сальников В.Д. Аналитический контроль металлургического производства. Учебник для вузов М.: Металлургия, 1995, 400 с.

52. Chalmers J.M. (Ed.), Griffiths P. (Ed.), The Handbook of Vibrational Spectroscopy, Wiley, в 5 томах, 2001.
53. Inductively coupled plasma mass spectrometry handbook. Ed. S. M. Nelms. CRC Press: Boca Raton, 2005.
54. Becker J.S., Inorganic Mass Spectrometry: Principles and Applications, Wiley, 2007
55. Practical Guide to ICP-MS. A Tutorial for Beginners, 2nd edition, R. Thomas, CRC Press, 2008
56. Inorganic Mass Spectrometry: Fundamentals and Applications, edited by Barshick Christopher M., Duckworth Douglas C., and Smith David H., CRC Press, 2000
57. Vanhaecke F., Degryse P., Isotopic analysis. Fundamentals and applications using ICP-MS Wiley, 2012
58. Hellborg R., Skog G., Stenström K., Accelerator Mass Spectrometry and its Applications 2013
59. Handbook of Stable Isotope Analytical Techniques, Elsevier, 2008
60. Mirabella F.M. Practical Spectroscopy Series; Internal reflection spectroscopy: Theory and applications. N.Y.: Marcel Dekker, Inc. 1993 – 384 p.
61. Coates J., Interpretation of Infrared Spectra, A Practical Approach. Encyclopedia of Analytical Chemistry, Meyers R.A. (Ed.), pp. 10815–10837, Wiley, Chichester, 2000
62. Mayo D.W., Miller F.A., Hannah R.W. Course notes on the interpretation of infrared and raman spectra, Wiley, 2003
63. Li P.C.H. Microfluidic lab-on-a-chip for chemical and biological analysis and discovery, London: CRC, 2006, 504 p.
64. Oosterbroek R.E., van den Berg A.J., Lab-On-A-Chip: Miniaurized Systems for (Bio) Chemical Analysis and Synthesis. Elsevier 2003, 402 p.
65. Kutter J.P., Fintschenko Y., Separation Methods in Microanalytical Systems, London: CRC, 2005, 592 p.
66. Chakrabarty K., Su F., Digital Microfluidic Biochips: Synthesis, Testing, And Reconfiguration Techniques. London: CRC 2006, 228 p.
67. Пробоподготовка в микроволновых печах. Теория и практика. под ред. Г.М. Кингстона и Л.Б. Джесси. пер. с англ. М.: Мир. 1991.
68. Лебстнер Л. Буйташ П. Химия в криминалистике. М.: Мир. 1990.
69. Каплан Б.Я., Филимонов Л.Н., Майоров И.А. Метрология аналитического контроля производства в цветной металлургии. М.: Металлургия, 1989.
70. Горелик Д.О., Конопелько Л.А., Панков Э.Д. Экологический мониторинг (в 2-х т.) СПб.: Крисмас. 1998.
71. Москвин Л.Н., Царицына Л.Г. Методы разделения и концентрирования в аналитической химии. Л.: Химия. 1991.
72. Спектрофотометрический анализ в органической химии / И.Я. Берштейн, Ю.Л. Каминский - 2-е изд., перераб. и доп. Л.: Химия. Лен. Отд., 1986.
73. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ, ИК и ЯМР спектроскопии в органической химии. Под. ред. А.Н. Несмеянова. М., 1968.

Справочные системы:

- NIST Chemistry Webbook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>),
- БД «Термические константы веществ» (<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html>)

Описание материально-технической базы:

Занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной оборудованием для демонстрации презентаций

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

докт. хим. наук, профессор Проскурнин Михаил Алексеевич proskurnin@gmail.com

докт. хим. наук, профессор Карякин Аркадий Аркадиевич, aak@analyt.chem.msu.ru
докт. хим. наук, профессор Веселова Ирина Анатольевна, irina.veselova@mail.ru
докт. хим. наук, профессор Родин Игорь Александрович, igorrodin@yandex.ru
докт. хим. наук, профессор Пирогов Андрей Владимирович, newandry@mail.ru
докт. хим. наук, гл.н.с. Аняри Владимир Владимирович, apyari@mail.ru
докт. хим. наук, в.н.с. Смоленков Александр Дмитриевич, smolenkov@bk.ru
докт. хим. наук, доцент Ставрианиди Андрей Николаевич, stavrianidi.andrey@gmail.com
докт. хим. наук, в.н.с. Статкус Михаил Александрович, mstatkus@gmail.com
канд. хим. наук, в.н.с. Волков Дмитрий Сергеевич, dmsvolkov@gmail.com
канд. хим. наук, доцент Михеев Иван Владимирович, mikheev.ivan@gmail.com
канд. хим. наук, с.н.с. Никитина Вита Николаевна, niki-vita@yandex.ru
канд. хим. наук, доцент Осолок Кирилл Владимирович, k_oskolok@mail.ru
канд. хим. наук, доцент Смирнова Светлана Валерьевна, sv_v_smirnova@mail.ru
канд. хим. наук, доцент Филатова Дарья Геннадьевна, gakl.analyt@gmail.com

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Раздел 1. Методология аналитической химии

Список вопросов для проведения текущей и промежуточной аттестации.

1. Сравните принципы действия и области применения спектроскопических методов современном химическом анализе.
2. Охарактеризуйте современные подходы к пробоподготовке и разделению в инструментальных методах аналитической химии, применяемых в материаловедении.
3. Роль физических методов анализа в материаловедении и их место среди инструментальных методов аналитической химии.
4. Инструментальные комплексы автоматизированного анализа: принципы построения и программное обеспечение.
5. Микро- и наноанализ: достоинства, физические ограничения и технологии миниатюризации методов.
6. Классификация физических методов анализа по принципу регистрации сигнала.
7. Аналитические методы анализа поверхности: чувствительность, пространственное разрешение, информативность.
8. Критерии выбора метода анализа для конкретного материала и задачи.
9. Современные тенденции в развитии инструментальных методов аналитической химии.
10. Основные объекты инструментального химического анализа в материаловедении.
11. Основные объекты инструментального химического анализа в при анализе объектов окружающей среды.
12. Мониторинг физико-химических параметров технологических процессов при помощи инструментальных методов анализа .
13. Стандарты и методики аттестации методов анализа материалов.
14. Тенденции и перспективы развития инструментальных методов анализа.
15. Физические принципы и преимущества микрофлюидных систем в инструментальном анализе.

Раздел 2. Спектральные методы анализа. Атомная и молекулярная спектроскопия. Атомная и молекулярная масс-спектрометрия

Список вопросов для проведения текущей и промежуточной аттестации

Темы 2.1 и 2.2

1. Охарактеризуйте физические принципы и аппаратное оформление методов молекулярной спектроскопии: УФ-видимой, ИК-, КР-, флуоресцентной

- спектроскопии, спектроскопии светорассеяния, оптоакустической и фототермической спектроскопии.
2. Разграничьте понятия спектроскопии, микроскопии и микроспектроскопии по физическим принципам регистрации.
 3. Возможности реализации молекулярно-спектроскопических методов в микроспектроскопическом варианте.
 4. Принципы и области применения абсорбционной микроспектроскопии в аналитической практике.
 5. Аппаратурные преимущества лазерной оптоакустической спектроскопии для микроанализа.
 6. Физические различия флуоресценции и фосфоресценции: механизмы, спектры, времена жизни.
 7. Механизмы тушения люминесценции: физические и химические причины и количественные характеристики.
 8. Физические ограничения линейности градуировочных зависимостей в люминесцентном анализе.
 9. Принципы лазерно-индуцированной флуоресцентной спектроскопии и микроспектроскопии, их аппаратурная реализация.
 10. Сравнение микроспектроскопических методов в рентгеновском, видимом и ИК-диапазонах по пространственному разрешению и чувствительности.
 11. Предпосылки развития спектроскопии в ближней ИК-области и особенности ее аппаратурного оформления.
 12. Предпосылки развития спектроскопии в дальней ИК-области и особенности ее аппаратурного оформления.
 13. Физические основы термолинзовой микроспектроскопии.
 14. Принципы фототермической радиометрии, физические преимущества и ограничения метода.
 15. Физическая основа послойного калориметрического анализа и его аппаратурное оформление.
 16. Применение молекулярной спектроскопии для решения задач физической химии и физики поверхности.
 17. Аппаратурные преимущества флуоресцентной спектроскопии в прикладных биохимических исследованиях.
 18. Физические принципы и аппаратура химического анализа микрообъектов и одиночных частиц.
 19. Сравнение абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии для анализа микрообъектов: преимущества и ограничения.
 20. Спектроскопические детекторы в современных хроматографических и электромиграционных системах.
 21. Физические возможности лазеров в системах дистанционного спектроскопического мониторинга.
 22. Сравнение спектроскопии светорассеяния, светопоглощения и флуоресценции для задач дистанционного мониторинга.
 23. Классификация методов спектрального анализа: спектроскопия, радиометрия, анализ изображений.
 24. Физические принципы и аппаратура лидарных систем спектрального анализа.
 25. Основные задачи и физические принципы гиперспектральной съемки в аналитическом мониторинге.
 26. Принципы и аппаратурные особенности дистанционного ИК-спектрального анализа.
 27. Физические основы и задачи дистанционного аналитического мониторинга.

28. Особенности конструкции аппаратуры для дистанционных спектроскопических измерений.
29. Применение корреляционной спектроскопии в системах дистанционного анализа: физические принципы и аппаратура.
30. Классификация методов атомной спектроскопии по источникам возбуждения и регистрации.
31. Принципы классификации оптических методов атомной спектроскопии и их аппаратурная реализация.
32. Объясните физические причины отклонения от линейности градуировочных кривых в атомно-эмиссионных методах при низких и высоких концентрациях. Способы коррекции нелинейности в области следовых содержаний.
33. Обоснуйте преимущества газоразрядных источников излучения в атомно-абсорбционной спектроскопии.
34. Физические основы и аппаратурные преимущества атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно-связанной плазмой.
35. Температурный режим электротермической атомизации в атомно-абсорбционной спектроскопии: этапы и назначение каждого.
36. Источники систематических погрешностей в атомных спектроскопических методах и способы их минимизации.
37. Физический принцип генерации и поддержания индуктивно-связанной плазмы в аналитических установках.
38. Аппаратурные решения для ввода проб в системы атомной спектроскопии.
39. Метрологические характеристики атомных спектроскопических методов: чувствительность, прецизионность и точность.
40. Физические ограничения применения атомно-абсорбционной и атомно-эмиссионной спектроскопии для анализа высоких концентраций.
41. Классификация методов рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии по глубине анализа.
42. Физические принципы рентгенофлуоресцентного анализа, сравнение волнодисперсионных и энергодисперсионных спектрометров.
43. Особенности рентгеноабсорбционного анализа, физические основы методов EXAFS, XANES, NEXAFS, XMCD.

Темы 2.3 и 2.4

1. Опишите физические принципы формирования масс-спектра и основные метрологические характеристики масс-спектрометров.
2. Сравните физические принципы действия различных типов масс-анализаторов и их аппаратурное оформление.
3. Объясните физические механизмы формирования аналитического сигнала и факторы, ограничивающие чувствительность ИСП-МС.
4. Охарактеризуйте аппаратурные подходы к пробоподготовке твердых, жидких и газообразных образцов для ИСП-МС анализа.
5. Расскажите о физических методах введения кислотных проб и проб с выкоми содержаниями органических веществ в плазму ИСП-МС.
6. Классификация масс-спектрометров по принципу ионизации и типу анализа.
7. Роль матрицы в процессах ионизации и формирования масс-спектров.
8. Принципиальная схема и приборное оформление МАЛДИ-МС.
9. Области применения МАЛДИ-МС в физико-химическом анализе микрообъектов.
10. Алгоритм идентификации полимеров и органических соединений методом МАЛДИ-МС.
11. Поисковые системы и алгоритмы обработки масс-спектров МАЛДИ для структурного анализа.

12. Физические основы идентификации неорганических частиц и кластеров методом МАЛДИ-МС.
13. Аппаратурные принципы пространственно-разрешенного масс-спектрометрического анализа.

Раздел 3. Хроматография. Электромиграционные методы и хромато-масс-спектрометрия

Список вопросов для проведения текущей и промежуточной аттестации

Темы 3.1–3.3

1. Физические принципы и аппаратное применение современной газовой хроматографии.
2. Роль газовой хроматографии в физико-химическом мониторинге атмосферных выбросов и газовых следов.
3. Примеры применения газовой хроматографии в анализе летучих компонентов жидкостей.
4. Физические основы расширения возможностей ГХ: реакционная хроматография и парофазный анализ.
5. Механизмы загрязнения детекторов ГХ и методы их аппаратной очистки.
6. Факторы селективности и эффективности разделения в хроматографических системах.
7. Классификация хроматографических методов по фазовому состоянию и механизму взаимодействия.
8. Физические принципы и аппаратная реализация обращенно-фазовой и ионно-обменной хроматографии.
9. Области применения ВЭЖХ в химическом анализе.
10. Физические принципы и характеристики современных детекторов для ВЭЖХ.
11. Аппаратурная реализация спектрофотометрических и флуориметрических детекторов в хроматографии.
12. Физические основы кондуктометрических и амперометрических детекторов в жидкостной хроматографии.
13. Диагностика аппаратных неисправностей хроматографических установок: признаки и физические причины.
14. Варианты капиллярного электрофореза и их аппаратная реализация.
15. Электрокинетический механизм зонного разделения в капиллярном электрофорезе.
16. Физические принципы мицеллярной электрокинетической капиллярной хроматографии.
17. Перспективные области применения капиллярного электрофореза в химическом анализе объектов малого объема.

Тема 3.4

1. Аппаратурные особенности и типы ионных источников в системах высокоэффективной жидкостной хроматографии–масс-спектрометрии.
2. Характеристики масс-анализаторов в ВЭЖХ–МС и их аналитические возможности.
3. Качественный анализ сложных смесей методом ВЭЖХ–МС: принципы и ограничения.
4. Возможности ВЭЖХ-МС(/МС) для определения следов в матрицах высокой сложности.
5. Современные области применения ВЭЖХ–МС.
6. Аппаратурные преимущества интеграции газовой хроматографии и масс-спектрометрии.
7. Основные ограничения метода ГХ-МС в аналитической практике.
8. Области применения ГХ-МС и обоснование выбора для анализа различных типов объектов.

9. Формирование аналитического сигнала в ГХ-МС (включая ГХ-МС/МС) для качественного и количественного определения веществ различных классов.
10. Особенности разделения многокомпонентных органических смесей на капиллярных колонках, критерии выбора колонок для известных и неизвестных веществ.

Раздел 4. Электрохимические методы анализа. Биохимические методы анализа. Сенсоры, биосенсоры и тест-методы

Список вопросов для проведения текущей и промежуточной аттестации

Темы 4.1–4.2

1. Электрохимическая термодинамика и кинетика.
2. Теории строения двойного электрического слоя; их эволюция.
3. Ток как функция потенциала. Уравнение разряда для обратимой реакции. Стационарная вольтамперометрия.
4. Нормальная импульсная вольтамперометрия. Форма задаваемого сигнала и форма вольтамперной кривой. Ток как функция концентрации.
5. Дифференциальная импульсная вольтамперометрия.
6. Линейная развертка потенциала. Форма задаваемого сигнала и форма вольтамперной кривой.
7. Циклическая вольтамперометрия.
8. Визуализация отдельных наночастиц. Визуализация единичной молекулы. Электрохимическая микроскопия.

Темы 4.3–4.4

1. Что представляют собой инструментальные сенсорные методы анализа? Их аналитические возможности и области применения в контроле процессов.
2. Приведите примеры высокомолекулярных реагентов-рецепторов, используемых в сенсорных системах аналитической химии. Примеры аппаратной реализации.
3. Способы регистрации аналитического сигнала в сенсорных системах.
4. Принципы иммунохимических сенсоров.
5. Аналитические преимущества методов, основанных на молекулярном распознавании, и их роль в многокомпонентном и мультиплексном анализе.
6. Что такое химический сенсор? Аппаратурная схема сенсорных систем и принципы преобразования сигнала.
7. Этапы развития сенсорных технологий: электрохимические, оптические и пьезоэлектрические трансдюсеры.
8. Классификация сенсоров по механизму распознавания и типу преобразователя..
9. Принципы амплификации сигнала в сенсорных системах и их аналитическое значение.
10. Мультисенсорные массивы и электронный нос: аппаратные принципы и области применения.
11. Наносенсорные системы: аппаратная реализация, аналитические возможности и перспективы.

Примерные темы рефератов

1. Математическое моделирование масс-спектров: принципы и алгоритмы.
2. Лазерная масс-спектрометрия: физические основы образования спектров и практическое применение метода.
3. Разделение ионов и сравнительные характеристики масс-спектрометров: математические модели.
4. Сенсоры: история развития, физические принципы и применение в материаловедении.
5. Физические сенсоры на основе поверхностных эффектов: сущность, устройство, метрологические характеристики и области применения в анализе поверхностей.
6. Спектроскопия поверхностного плазмонного резонанса: физические основы и использование в современной аналитической химии.

7. Мультисенсорные системы в материаловедении: физические принципы, устройство, обработка сигналов.
8. Наносенсорные системы на основе квантовых точек: классификация, физические модели и перспективы.
9. Физические и физико-химические методы анализа объектов окружающей среды.
10. Пробоподготовка в оптической УФ-видимой и люминесцентной спектроскопии: современные подходы.
11. Метрологическая обработка результатов в оптической молекулярной спектроскопии: статистические методы и алгоритмы.
12. Определение примесей в твердых телах методом атомно-абсорбционной и атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно-связанной плазмой.
13. Пробоподготовка и ввод пробы в атомно-эмиссионные и масс-спектрометры: современные технологии.
14. Определение тяжелых металлов на уровне следов в полупроводниковых материалах методом атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно-связанной плазмой.
15. Современные методы вольтамперометрии физические принципы и применение.
16. Импедансная спектроскопия в химическом анализе: аппаратное обеспечение и метрологические характеристики.
17. Хронопотенциометрия для количественного анализа: примеры и ограничения.
18. Газовая хроматография: физические основы разделения, детекторы и количественный анализ.
19. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ): математические модели элюирования и оптимизации условий разделения.
20. Капиллярный электрофорез: принципы, устройство и применение в определении малых молекул.

Примеры ПКЗ

Задание 1.

Для оценки чистоты полупроводниковых пластин в микроэлектронике необходимо контролировать поверхностные примеси тяжелых металлов (Pb, Cd, Cr) на уровне ppb. Какой спектроскопический метод наиболее целесообразно использовать. Выбор обоснуйте.

Задание 2.

Укажите наиболее целесообразный экспрессный (менее 5 минут) метод определения неорганических катионов – Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Fe^{3+} в геологических образцах. Выбор обоснуйте.

Задание 3.

При разработке наноматериалов для катализа требуется контролировать размер и форму наночастиц металлов (Au, Ag) в суспензиях. Какие методы необходимо выбрать для такого анализа? Выбор обоснуйте.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проходит по билетам, каждый из которых включает три теоретических вопроса. Уровень знаний аспиранта оценивается по каждому вопросу на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже, чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено».

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка Результат	Незачёт (2)	Зачёт (3)	Зачёт (4)	Зачёт (5)
Знания	Отсутствие базовых знаний о современных концепциях и законах аналитической химии	Общие, но неглубокие знания о современных концепциях и законах аналитической химии, содержащие пробелы	Общие, но не структурированные знания о современных концепциях и законах аналитической химии	Сформированные систематические знания о современных концепциях и законах аналитической химии
Умения	Отсутствие умения применять знания в современном состоянии аналитической химии для решения научных задач	В целом успешное, но не систематическое умение применять знания в современном состоянии аналитической химии для решения научных задач	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение применять знания в современном состоянии аналитической химии для решения научных задач (допускает неточности не принципиального характера)	Успешное и систематическое умение применять знания в современном состоянии аналитической химии для решения научных задач
Навыки (владения)	Отсутствие навыков решения актуальных задач аналитической химии	Наличие навыков решения актуальных задач аналитической химии, не всегда верно используемых	В целом, сформированные навыки решения актуальных задач аналитической химии, но не в активной форме	Сформированные навыки решения актуальных задач аналитической химии, применяемые при решении практических задач