

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ**  
**Інститут колоїдної хімії та хімії води ім. А.В. Думанського**  
**Національної Академії Наук України**

**ЗАТВЕРДЖЕНО**

Вченою радою Інституту колоїдної хімії та  
хімії води ім. А.В. Думанського  
НАН України  
пр. № 2 від « 31 » січня 2025 року

Директор  
Інституту колоїдної хімії та  
хімії води ім. А.В. Думанського  
НАН України  
академік НАН України  
Владислав ГОНЧАРУК



**ПРОГРАМА**

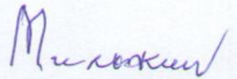
**навчальної дисципліни**

**«ФІЗИКО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ МОНІТОРИНГУ ОРГАНІЧНИХ ТА  
НЕОРГАНІЧНИХ ЕКОТОКСИКАНТІВ У ВОДНИХ СИСТЕМАХ»**

<b>ГАЛУЗЬ ЗНАНЬ</b>	<b>10 – ПРИРОДНИЧІ НАУКИ</b>
<b>СПЕЦІАЛЬНІСТЬ</b>	<b>102 – ХІМІЯ</b>
<b>РІВЕНЬ ОСВІТИ</b>	<b>ТРЕТІЙ (ОСВІТНЬО-НАУКОВИЙ)</b>
<b>КВАЛІФІКАЦІЯ</b>	<b>ДОКТОР ФІЛОСОФІЇ</b>

РОЗРОБНИК ПРОГРАМИ:


Заступник директора з наукової роботи, провідний науковий співробітник, доктор хімічних наук, старший науковий співробітник, **Мілюкін Михайло Васильович**

  
(підпис)

Програму затверджено на засіданні Вченої ради  
Інституту Інституту колоїдної хімії та  
хімії води ім. А.В. Думанського НАН України

Протокол № 2  
від « 31 » січня 2025 року

Вчений секретар

  
Людмила ЮРЛОВА

## Вступ

Програму навчальної дисципліни **«Фізико-хімічні методи моніторингу органічних та неорганічних екотоксикантів у водних системах»** складено відповідно до освітньо-професійної програми підготовки **«доктор філософії»** в галузі 10 (Природничі науки) напрямку (спеціальності) 102 **«Хімія»**.

**Предметом** вивчення даної дисципліни є фізико-хімічні методи ідентифікації, визначення органічних та неорганічних токсикантів (спектроскопічні, хроматографічні, хромато-мас-спектрометричні, електрохімічні, флуоресцентні та інші), а також проведення їх моніторингу у об'єктах водних систем (вода, донні відкладення, гідробіоти) з метою поняття фізичних, хімічних та біологічних процесів, що протікають в довкіллі, та оцінки екологічного стану природного водного середовища.

Дисципліна спрямована на надання базових знань у області аналітичної та екологічної хімії, екотоксікології, сучасних методів моніторингу з використанням високоефективних та високоінформативних методів дослідження та захисту природних водних систем. Сучасні методи дослідження, захисту та відновлення довкілля базуються на вивченні та застосуванні окислювально-відновлювальних процесів, які є основою існування біосфери. Тому ця дисципліна формує у аспірантів науково обґрунтований досвід для вирішення завдань в галузі природничих наук з використанням не тільки теоретичних знань з фізичної, аналітичної хімії та електрохімії, але й практичних навичок, що пов'язані з правильним застосуванням методів контролю довкілля та інженерних рішень щодо захисту та відновлення вже забруднених об'єктів водних систем.

**Міждисциплінарні зв'язки.** Навчальна дисципліна **«Фізико-хімічні методи моніторингу органічних та неорганічних екотоксикантів у водних**

**системах»** належить до циклу дисциплін професійної підготовки аспірантів в галузі 10 (Природничі науки) напряму (спеціальності) 102 «Хімія».

Необхідною умовою засвоєння цієї дисципліни є володіння загальноосвітніми курсами з філософії та методології науки, фізики, хімії, зокрема аналітичної хімії, фізичної хімії, фізико-хімічних методів дослідження (хроматографія, хромато-мас-спектрометрія, флуоресценція, електрохімічні методи) та математики, інформатики, які вивчають у вищих навчальних закладах при підготовці фахівців по спеціальності «Хімія».

Дисципліна **«Фізико-хімічні методи моніторингу органічних та неорганічних екотоксикантів у водних системах»** є основою для поглиблення знань з «Екологічної безпеки», що забезпечує зв'язок цих дисциплін при підготовці фахівців в природничих науках, які спроможні забезпечити кваліфіковану оцінку впливу хімічних речовин на навколишнє середовище та вибрати необхідні технології для його захисту, «Колоїдної хімії», «Хімії, фізики та біології води», «Адсорбції», «Фізико-хімічної механіки», «Мембранних технологій», «Технологій водрпідготовки та водоочищення».

## **1. Мета та завдання навчальної дисципліни**

### **1.1. Мета навчальної дисципліни.**

Метою є формування у студентів знань щодо основних екологічних понять, законів, принципів та методів моніторингу органічних та неорганічних екотоксикантів водних систем, а також хімічних, електрохімічних і фізико-хімічними процесів, що протікають в природних водних системах.

### **1.2. Основні завдання навчальної дисципліни.**

Основними завданнями вивчення дисципліни є формування у студентів здатностей до аналізу екологічної ситуації та навиків екологічної експертизи і раціонального природокористування. Згідно з вимогами освітньо-професійної програми аспіранти після засвоєння навчальної дисципліни мають продемонструвати такі результати навчання:

### **Знання**

**знати:** основні екологічні поняття і закони. Склад і структура біосфери. Загальні закони екології, біогеохімічні цикли біогенних елементів. Види моніторингу органічних та неорганічних токсикантів. Хроматографічні, хромато-мас-спектрометричні, спектроскопічні, флуоресцентні та електрохімічні методи моніторингу. Основні технології корегування та захисту водних систем.

**вміти:** застосовувати перераховані сучасні методи моніторингу, робити розрахунки відносно оцінки екологічного стану об'єктів водних систем, визначати джерело забруднення, виділяти об'єкт для моделювання певної екологічної ситуації, застосовувати необхідні технологічні рішення.

**мати досвід:** в оцінці зони екологічного дослідження, визначати джерело забруднення, виділяти об'єкт для моделювання певної екологічної ситуації, в застосовуванні необхідних технологічних рішень.

Дана дисципліна передбачає формування та розвиток вагомих компетенцій, що перераховані нижче.

### **Універсальні компетенції:**

– здатність до виконання критичного аналізу та оцінку сучасних наукових досягнень, генерувати нові ідеї при вирішенні дослідницьких та практичних завдань стосовних стану довкілля та можливостей його відновлення;

- здатність планувати та здійснювати комплексні дослідження, у тому числі міждисциплінарні, на основі системного наукового світогляду з використанням отриманих знань;
- можливість використовувати сучасні методи та технології наукової комунікації державною та іноземними мовами.

### **Загальнопрофесійні компетенції.**

- здатність приймати участь у роботі творчих колективів (включно міжнародні), вміти створювати такі колективи для вирішення актуальних проблем захисту та відновленню довкілля.
- здатність слідувати етичним нормам у професійній діяльності.
- здатність самостійно здійснювати науково-дослідницьку діяльність в галузі дослідження та відновлення навколишнього середовища з використанням сучасних методів та інформаційно-комунікаційних технологій.

### **Професійні компетенції:**

- здатність самостійно організовувати проведення моніторингових та технологічних досліджень, виконувати обробку та аналіз результатів досліджень, проводити їх узагальнення у вигляді звітів та наукових статей для фахових журналів.
- вільне володіння сучасними фізико-хімічними методами моніторингу.
- вміння самостійно формулювати завдання наукових досліджень та вирішувати технологічні завдання шляхом створення нових матеріалів та приладів.

## 2. Структура навчальної дисципліни

На вивчення навчальної дисципліни відводиться: дисципліна вивчається на третьому році навчання за освітньо-науковим рівнем «доктор філософії» в обсязі 120 годин, у тому числі 24 годин аудиторних занять (20 – лекційні заняття, 4 – практичні), 96 годин самостійної роботи. Навчальна дисципліна має 4 кредитів ECTS.

### Рекомендований розподіл навчального часу

Кредитні модулі	Всього		Розподіл навчального часу за видами занять				Семестрова атестація
	кредитів	годин	Лекції	Практичні (семінарські) заняття	Лабораторні роботи (комп'ютерні практикуми)	СРС	
Всього	4	24	20	4	–	96	
Модуль 1	2	12	10	2	–	48	диф. залік
Модуль 2	2	12	10	2	–	48	диф. залік

### Навчальна дисципліна містить два кредитні модулі:

**Модуль 1.** Основні екологічні поняття і закони, види моніторингу, спектроскопічні та флуоресцентні фізико-хімічні методи дослідження для моніторингу об'єктів водних систем.

**Модуль 2.** Хроматографічні, хромато-мас-спектрометричні та електрохімічні фізико-хімічні методи дослідження для моніторингу об'єктів водних систем та оцінка пошкодження природного середовища на основі даних моніторингу. Основи інженерної екології та природоохоронна діяльність підприємств.

### **3. Зміст та структура кредитних модулів навчальної дисципліни**

#### **Кредитний модуль 1. Основні екологічні поняття і закони, види моніторингу, спектроскопічні та флуоресцентні фізико-хімічні методи дослідження для моніторингу об'єктів водних систем.**

##### **Тема 1: Основні екологічні поняття і закони, види моніторингу.**

Склад і структура біосфери. Основні поняття екологічної хімії (забруднювачі, ксенобіотики, екотоксиканти). Наукові основи екологічного моніторингу. Види моніторингу. Локальний, регіональний, глобальний. Методи моніторингу. Контроль фонового забруднення водних систем.

**Тема 2. Нормування якості водного природного середовища.** Нормування впливу забруднювачів. Класи небезпечності речовин. Забір проб та їх підготовка до аналізу. Розрахунки норм граничних екологічних навантажень, летальних доз.

##### **Тема 3. Спектроскопічні та флуоресцентні фізико-хімічні методи дослідження для моніторингу об'єктів водних систем.**

###### Лекція 1. Методи дослідження органічних сполук.

Методи дослідження органічних сполук. Аналіз органічних сполук. Якісний та кількісний аналіз. Автоматичні аналізатори елементів (вуглець, водень, азот та ін.). Хімічні методи встановлення будови (подвійний зв'язок, фенольної або енольної групи гідроксиду). Реакції окиснення альдегідів. Відкриття альдегідних груп («альдегідні реакції»): окиснення оксидом срібла (реакція «срібного дзеркала»), окиснення гідроксидом міді (II), окиснення фелінговим розчином (або фелінговою рідиною) (калієво-натрієва сіль виннокам'яної кислоти (сегнетова, або сеньєтова сіль; K, Na-тартрат), CuSO<sub>4</sub> та NaOH. Фелінговий розчин як реактив для відкриття та кількісного визначення відновлюючих речовин – альдегідів, сахарів та ін. Якісні реакції виявлення фенолу, деяких двохатомних фенолів (пірокатехін, або *o*-дигідроксибензол), резорцину, або *m*-дигідроксибензолу, гідрохінону, або *n*-гідроксибензолу, пірогаллолу або рядового тригідроксибензолу, флороглуцину або симетричного тригідроксибензолу. Кількісне визначення пентоз з



флороглуцином. Якісні та кількісні реакції з фенілгідразином (2,4-динітрофенілгідразином) та іншими реагентами.

Електромагнітне випромінювання. Області електромагнітного спектра.

Електромагнітне випромінювання. Області електромагнітного спектра. Різні типи електромагнітного випромінювання: світло – ультрафіолетовий, видимий, інфрачервоний; рентгенівські промені (гамма-промені) та радіопримені різної довжини. Швидкість розповсюдження електромагнітного випромінювання. Зв'язок частоти з довжиною хвилі  $v = c/\lambda$ . Зв'язок кількості отриманої енергії електромагнітного випромінювання з частотою випромінювання: чим вища частота (чим менша довжина хвилі), тим більший приріст енергії  $\Delta E = h \cdot v$ . Фізична природа перетворень енергії в поглинаючій молекулі речовини (перехід електронів на більш високі енергетичні рівні, коливання або обертання атомів в молекулі та ін.). Спектр сполуки та його фізична суть.

Електронна спектроскопія. Основний закон світлопоглинання (закон Бугера–Ламберта–Бера) та його застосування для дослідження органічних та неорганічних сполук.

Електронна спектроскопія. Спектр світлопоглинання. Основні величини, що характеризують світлопоглинання: пропускання  $T$ , коефіцієнт пропускання, оптична густина  $A$  або  $D$ . Основний закон світлопоглинання (закон Бугера–Ламберта–Бера). Молярний коефіцієнт світлопоглинання. Чутливість фотометричної реакції. Відхилення від закону світлопоглинання. Способи визначення концентрації речовини за величиною оптичної густини: методи градуовального графіка, порівняння зі стандартом, стандартних добавок. Переваги фотометричного методу аналізу (дослідження).

Електронна спектроскопія. Основний закон світлопоглинання (закон Бугера–Ламберта–Бера) та його застосування для дослідження органічних та неорганічних сполук.

Електронна спектроскопія. Спектр світлопоглинання. Типи електронних переходів при поглинанні світла:  $\sigma \rightarrow \sigma^*$ ,  $\pi \rightarrow \pi^*$  та  $n \rightarrow \sigma^*$ ,  $n \rightarrow \pi^*$ . Хромофори. Батохромний зсув. Електронні переходи в ізольованих та спряжених хромофорах. Основні величини, що характеризують світлопоглинання: пропускання  $T$ , коефіцієнт пропускання, оптична

густина  $A$  або  $D$ . Основний закон світлопоглинання (закон Бугера–Ламберта–Бера). Молярний коефіцієнт світлопоглинання. Чутливість фотометричної реакції. Відхилення від закону світлопоглинання. Способи визначення концентрації речовини за величиною оптичної густини: методи градуювального графіка, порівняння зі стандартом, стандартних добавок. Переваги фотометричного методу аналізу (дослідження).

Лекція 2. Інфрачервона спектроскопія та її застосування для дослідження органічних сполук (органічна хімія, хімічна технологія).

Інфрачервона спектроскопія. Нульовий коливальний стан. Основні типи: валентні коливання, деформаційні коливання (площинні коливання, позаплощинні коливання). Форми валентних та деформаційних коливань. Процент пропускання  $T$ , % ІЧ-спектра. Характеристичні частоти або смуги в ІЧ-спектрі. Чотири області ІЧ-спектра та їх аналіз кожної з них. Застосування ІЧ-спектроскопії в органічній хімії та хімічній технології.

Лекція 3. Люмінесценція.

Атомно-флуоресцентний аналіз. Способи збудження (електромагнітне випромінення (УФ-, видиме світло); енергія хімічних реакцій; енергія хімічних реакцій, що протікають у живих організмах; рентгенівське випромінення; електрична енергія (катодні промені)). Види люмінесценції (фотолюмінесценція (флуоресценція та фосфоресценція); хемілюмінесценція; біолюмінесценція; рентгенофлуоресценція; електролюмінесценція (катодолюмінісценція)). Явище люмінесценції. Правило Стокса. Правило Левшина. Закон Вавилова. Концентраційне гасіння люмінесценції. Поляризована люмінесценція. Термолюмінесценція та її використання для дослідження біологічних та синтетичних полімерів. Люмінол. Люмінесцентні індикатори. Люмінесцентний аналіз. Люмінесцентні реагенти.

**Кредитний модуль 2. Хроматографічні, хромато-мас-спектрометричні та електрохімічні фізико-хімічні методи дослідження для моніторингу об'єктів водних систем та оцінка пошкодження природного середовища на основі даних моніторингу. Основи інженерної екології та природоохоронна діяльність підприємств.**

## **Тема 4. Хроматографічні, хромато-мас-спектрометричні та електрохімічні фізико-хімічні методи дослідження для моніторингу об'єктів водних систем**

### Лекція 6. Хроматографічні методи дослідження органічних сполук.

Хроматографічні методи дослідження органічних сполук. Загальні положення. Основні види хроматографії. Історія розвитку хроматографії. Адсорбційна хроматографія. Тонкошарова хроматографія. Розподільувальна хроматографія (колоночна, висхідна, низхідна, двомірна). Газова, газо-рідинна хроматографія. Способи дериватизації органічних сполук з метою підвищення леткості дериватів. Іонообмінна хроматографія. Гель-проникна хроматографія. Електрофорез (електрохроматографія). Рідинна хроматографія. Афінна хроматографія. Іона хроматографія.

Мас-спектрометрія. Мас-спектр електронної іонізації.

Мас-спектрометрія. Мас-спектр електронної іонізації. Хромато-мас-спектрометрія (ГХ/МС або GC/MS, РХ/МС або HPLC/MS, більш складні гібридні методи — ГХ/МС/МС або GC/MS/MS, РХ/МС/МС або HPLC/MS/MS та ін.).

### Лекція 7. Основи теорії хроматографії.

Основи теорії хроматографії. Утримування (час утримування, об'єм утримування). Основне рівняння хроматографії. Селективність розділення хроматографічних піків. Ефективність хроматографічної колонки. Число теоретичних тарілок. Висота, що еквівалентна теоретичній тарілці. Степінь розділення. Рівняння ван-Деємтера. Індокси утримування (Ковача, Ван-ден-Доола і Кратса).

Основи теорії хроматографії.

Основи теорії хроматографії. Сорбенти в хроматографії. Рухомі фази в хроматографії. Нерухомі фази в хроматографії. Модифікація поверхні (на прикладі силікагелю). Нормально-фазові сорбенти. Обернено-фазові сорбенти. Іон-парні сорбенти. Іонообмінні сорбенти. Газові хроматографи.

Основи теорії хроматографії.

Основи теорії хроматографії. Газові хроматографи. Рідинні хроматографи. Хромато-мас-спектрометри. Мас-спектрометри з індуктивно-зв'язаною плазмою. Загальна схема газового хроматографу. Split, splittless інжектори. Капілярні колонки. Хроматограма, яка одержана на капілярній колонці. Аксесуари у газовій хроматографії. Застосовність газової та рідинної хроматографії в залежності від полярності та леткості сполук. Детектори в газовій хроматографії (загальні та селективні). Flame ionization detector (FID) – Полум'яно-іонізаційний детектор (ПІД). Mass selective detector (MSD) – Мас-селективний детектор (МСД) (режими SCAN та SIM). TPD (NPD) – Termoionic detector (NPD) (АФД – термоіонний детектор для підтвердження наявності сполук азоту і фосфору в молекулах визначальних сполук. FPD P – Flame photometric detector P (ПФД – полум'яно-фотометричний детектор за фосфором).  $\mu$ ECD – micro-Electron capture detector ( $\mu$ ЕЗД – мікро-електронно-захоплювальний детектор або ДЕЗ – детектор електронного захоплення. Схема, що ілюструє три основні стадії процесу аналізу: підготовка проб до аналізу, газохроматографічне роділення, хромато-мас-спектрометричне визначення. ГХ/МС при використанні трьох селективних детекторів – МСД (MSD), ЕЗД ( $\mu$ ECD), ПФД (FPD P). Схема та принцип роботи тандемного триквадрупольного МС/МС детектора у режимі молекулярного розділення мас. Унікальні програмно-апаратні комплекси Agilent Technologies. RTL-бібліотеки і RTL-бази даних. Програмне забезпечення DRS (deconvolution reporting software).

Лекція 8. Чутливість і селективність визначення при використанні різних типів детекторів у ВЕРХ.

Чутливість і селективність визначення при використанні різних типів детекторів у ВЕРХ. Тип детектора та умови детектування впливають на відгук у трьох взаємопов'язаних напрямках: чутливість, селективність, шум базової лінії. Правильний вибір довжини хвилі детектування ( $\lambda$ , нм). Чутливість як синонім «нижня межа виявлення даної речовини». Залежність форми хроматограм зразка від типу детектування. Селективність. Співвідношення сигнал/шум (S/N): шум як функція умов детектування; час відгуку змінюється від 0,1 до 5 сек. Джерело випромінювання: дейтерієва лампа, високоенергетична галогенова лампа розжарювання. Взаємозв'язок концентрації аналіту (с, моль/л) в проточній кюветі з поглинанням А, молярним коефіцієнтом світлопоглинання ( $\epsilon$ )

і довжиною проточної кювети (1, см) відповідно до закону Бугера-Ламберта-Бера. Принципові схеми спектрофотометричних детекторів: а) проточна кювета розташована до монохроматора, б) проточна кювета розташована після монохроматора. УФ-поглинання розчинників і добавок до них в ОФ ВЕРХ залежно від довжини хвилі. УФ-поглинання розчинників в НФ ВЕРХ залежно від довжини хвилі. Універсальні детектори. Рефрактометричний детектор. Пароутворюючий детектор світлорозсіювання (Evaporative Light Scattering Detector, ELSD). Флуоресцентний детектор. Корисні суміші розчинників із низьким фоновим поглинанням ( $<0,5$  au) за  $\lambda \geq 200$  нм. Електрохімічні детектори. Кондуктометричний детектор. Амперометричний детектор. Принципова схема, що показує проточну комірку для амперометричного електрохімічного детектора. Мас-спектрометричний детектор. Варіанти моніторингу хроматограми при використанні мас-спектрометра в якості детектора. Порівняння характеристик детекторів в рідинній хроматографії.

Формула Нернста. Пряма потенціометрія. Потенціометричне титрування. рН-метрія. Електроди. Водневий електрод. Каломельний електрод. Розрахунок концентрації іонів водороду. Кондуктометрія. Вольтамперометрія. Полярографія та сенсорні вимірювання. Оцінка похибки та чутливості методів.

## **Тема 5. Мас-спектрометрія з індуктивно зв'язаною плазмою для дослідження і моніторингу важких металів у об'єктах водних систем.**

Лекція 9. Основи методу, конструкція і принцип роботи мас-спектрометрії з індуктивно зв'язаною плазмою.

Основи методу, конструкція і принцип роботи мас-спектрометрії з індуктивно зв'язаною плазмою. Об'єкти аналізу в мас-спектрометрії з індуктивно зв'язаною плазмою. Основи методу. Конструкція мас-спектрометрів з індуктивно зв'язаною плазмою. Система введення зразка. Індуктивно зв'язана плазма. Процеси, що відбуваються в індуктивно зв'язаній плазмі. Інтерфейсна частина мас-спектрометрії з індуктивно зв'язаною плазмою. Іонна оптика. Мас-фільтрація і детектування іонів.

## **Тема 6. Оцінка пошкодження природного середовища на основі даних моніторингу. Основи інженерної екології та природоохоронна діяльність підприємств.**

Лекція 10. Оцінка пошкодження природного середовища на основі даних моніторингу. та основи інженерної екології та природоохоронна діяльність підприємств.

### **4. ФОРМА ПІДСУМКОВОГО КОНТРОЛЮ УСПІШНОСТІ НАВЧАННЯ**

Екзамен.

### **5. КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ НАВЧАЛЬНИХ ЗДОБУТКІВ АСПРАНТА З ДИСЦИПЛІНИ**

Контроль навчальних досягнень аспірантів реалізується за наступною схемою. Оцінюються наступні складники:

- Аудиторна робота аспіранта (письмова модульна контрольна робота МКР по лекційному матеріалу) – 20 б;
- Робота на практичних заняттях (усне опитування, участь в обговоренні дискусійних питань) – 20 б;
- Самостійна робота (реферат) – 20 б;
- Екзамен – 40 б.

МКР виконується звичайно в середині навчального курсу, якщо підсумковий контроль передбачає екзамен. МКР оцінюється наступним чином:

- «відмінно» (20 б) - відповіді на питання чіткі та правильні, повні, обґрунтовані, завдання розв'язані вірно, з поясненнями;
- «добре» (15 б) – відповіді правильні, обґрунтовані, але не вичерпні (містять не менше 75% потрібної інформації), є несуттєві помилки у формулах, термінології, технічних характеристиках;
- «задовільно» (10 б) – відповіді неповні (містять менше 60% необхідної інформації);
- «незадовільно» (5 б) – відповіді носять загальний поверхневий характер, завдання не розв'язані, є помилки у формулах, термінології, технічних характеристиках;
- неявка на МКР – 0 балів.

Усне опитування оцінюється за наступними критеріями (на першому занятті викладач повинен озвучити кількість опитувань та максимальну кількість балів, які можна отримати за кожне опитування, наприклад, 5 опитувань по 2 бали):

- відповідність змісту відповіді поставленим питанням;
- повнота і ґрунтовність викладення матеріалу;
- коректність у формулах, термінології, технічних характеристиках;
- здатність на основі викладеного матеріалу зробити висновки та прогнозування проблеми.

Участь в обговоренні дискусійних питань має продемонструвати знання матеріалів лекцій, практичних занять, обов'язкової літератури та точку зору аспіранта з дискусійного питання й аргументацію щодо неї. Вона оцінюється за наступними критеріями (на першому занятті викладач повинен озвучити кількість обговорень та можливі бали за кожне з них, наприклад, 2 дискусії по 5 балів):

- знання матеріалу теми (поняття, концепції, методи, світова практика);
- певні практичні навички (знання відповідних методик та методів наукових досліджень);
- грамотність та самостійність у формулювання тверджень, висновків та прогнозів;
- аргументованість та вміння відстояти свою точку зору.

Самостійна робота аспіранта, результатом якої є написання реферату – 20 балів. Реферат – розробка теми на основі поглибленого вивчення літературних джерел до неї. Реферат оцінюється за наступними критеріями:

- чіткість і послідовність викладення матеріалу відповідно до самостійно складеного плану (у текстовій частині кожне питання плану має бути виділено окремо);
- правильність та логічність цитувань, ґрунтовність їх узагальнення та висновків, зроблених на основі вивчення літератури загалом;
- наявність і правильне оформлення списку літератури (з точними бібліографічними даними), яку аспірант вивчив і використав при написанні реферату.

У рефераті мають бути відображені головні питання теми і показано вміння відбирати найважливіший та актуальний матеріал, що стосується теми (4 б); переконливо обґрунтовувати і аргументувати головні положення роботи (4 б); викладати питання грамотно, стисло, ясно, послідовно (4 б); робити правильні логічні висновки, узагальнення, прогнозування проблеми (4 б); правильно оформлювати реферат та список використаної

літератури, відповідно до вимог викладача дисципліни (4 б). Якщо передбачається публічний захист реферату, викладач повідомляє про це на першому занятті.

Аспірант вважається допущеним до підсумкового контролю – екзамену, якщо він виконав усі види робіт, що передбачені робочою програмою навчальної дисципліни.

Загальна оцінка за екзамен по білету підраховується як сумарна кількість оцінок, отриманих за кожне питання білета (в тому числі й додаткове). Кількість питань в білеті – 4.

Шкала та критерії оцінювання відповіді аспіранта на екзамені:

- «відмінно» (10 б) – аспірант глибоко і всебічно знає зміст запитання, орієнтується в актуальній науковій літературі; логічно мислить і будує відповідь, вільно використовує набуті теоретичні знання при аналізі та відповіді на питання; пов'язує матеріал дисципліни з сучасними науковими проблемами; демонструє високий рівень компетентності; здатний передбачати, прогнозувати, вирішувати проблемні завдання;

- «дуже добре» (9-8 б) – аспірант правильно, логічно відтворює навчальний матеріал, розуміє основоположні теорії і факти; вміє наводити окремі власні приклади на підтвердження певних думок, застосовує вивчений матеріал у стандартних ситуаціях, вміє робити висновки та частково прогнози;

- «добре» (7-5 б) – аспірант знає навчальний матеріал; послідовно викладає основні положення та висловлює свої міркування по тематиці питання, але припускається певних неточностей, помилок та похибок;

- «задовільно» (4-3 б) – аспірант в основному знає зміст питання, але не досить переконливо відповідає, плутає поняття; не впевнений у відповіді, допускає неточності; не достатньо чітко вміє оцінювати факти та явища, встановлювати взаємозв'язок теорії та практики;

- «незадовільно» (2-1 б) – аспірант не може розкрити суть питання; відповідає лише з допомогою екзаменатора; слабо орієнтується в теорії та сучасному стані проблеми;

- 0 б – неявка на екзамен.

Максимальний бал аспіранта за навчальну дисципліну становить 100 балів. До індивідуального плану вноситься сумарна кількість балів, отримана аспірантом за навчальну дисципліну у графу «Сума балів».



## 6. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

### Література 1

#### Закон Бугера-Ламберта-Бера

1. Thomas G. Mayerhöfer, Susanne Pahlow, Jürgen Popp. The Bouguer-Beer-Lambert Law: Shining Light on the Obscure. *Chem Phys Chem*. 2020. Vol. 21. P. 2029–2046.

### Література 2, 3

1. [Paul C. Sadek](#). Troubleshooting HPLC Systems: A Bench Manual. John Wiley&Sons, Ltd, 1999. 320 p.

2. J. Calvin Giddings. Unified Separation Science. New York: Wiley/Interscience, 1991. 352 p.

3. [Clifton E. Meloan](#). Chemical Separations: Principles, Techniques and Experiments. New York: Wiley, 1999. 768 p.

4. J. Cazes, ed. Encyclopedia of Chromatography. New York – Basel: Marcel Dekker, 2001. 997 p.

5. [Douglas A. Skoog](#), [Donald M. West](#), [F. James Holler](#), [Stanley R. Crouch](#). Fundamentals of Analytical Chemistry. Edition 10, Publisher: Cengage Learning, 2021. 1072 p.

6. [Daniel C. Harris](#), Charles A. Lucy. Quantitative Chemical Analysis. Eleventh Edition. 2026.

7. [Daniel C. Harris](#), Charles A. Lucy. Quantitative Chemical Analysis. Seventh Edition. New York: W.H. Freeman and Company, 2007.

8. [Daniel C. Harris](#). Solutions manual for Quantitative chemical analysis. Ninth Edition. New York, NY: W.H. Freeman and Company: a Macmillan Education Company Collection, 2016. 412 p.

9. [H.-D. Belitz](#), [Werner Grosch](#), [Peter Schieberle](#). Food Chemistry. Fourth Edition. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009. 1070 p. DOI 10.1007/978-3-540-69934-7

10. Milyukin M.V., Goncharuk V.V. Chemical monitoring of organic ecotoxicants in water systems. Kyiv: Naukova Dumka, 2016, 308 p.

11. Burgess R.M., Terletska A.V., Milyukin M.V., Povolotsky M.I., Demchenko V.Ya., Bogoslovskaya T.A., Topkin Yu.V., Vorobyova T.V., Petrov A.N., Lyashenko A.V., Ho K.T. Concentration and distribution of hydrophobic organic contaminants and metals in the estuaries of Ukraine. *Marine Pollution Bulletin*. 2009. Vol. 58, N 8. P. 1103–1115.

<https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2009.04.013>, [Q1]

12. Burgess R.M., Konovets I.M., Kipnis L.S., Lyashenko A.V., Grintsov V.A., Petrov A.N., Terletska A.V., Milyukin M.V., Povolotsky M.I., Demchenko V.Ya., Bogoslovskaya T.A., Topkin Yu.V., Vorobyova T.V., Portis L.M., Ho K.T. Distribution, magnitude and characterization of the toxicity of Ukrainian estuarine sediments. *Marine Pollution Bulletin*. 2011. Vol. 62, N 11. P. 2442–2462.

<https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2011.08.023>, [Q1]

13. Ho K.T. Contaminants, Mutagenicity and Toxicity in the Surface Waters of Kyiv,

Ukraine / K.T. Ho, I.M. Konovets, A.V. Terletskaia, M.V. Milyukin, A. Lyashenko, L.I. Shitikova, L.I. Shevchuk, S.O. Afanasiev, Yu.G. Krot, K.Ye. Zorina-Sakharova, V.V. Goncharuk, M.M. Skrynnyk, M. Cashman, R.M. Burgess // *Marine Pollution Bulletin*. 2020. Vol. 155. 111153.

<https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2020.111153>, [Q1]

14. Milyukin M.V. Concentrations and regularities of disperse-phase distribution of organochlorine pesticides, polychlorinated biphenyls and polycyclic aromatic hydrocarbons in natural water / M.V. Milyukin, M.V. Gorban // *Mediterr. J. Chem.*, 2021, 11(1), 32–42.

<https://dx.doi.org/10.13171/mjc10902011211519mvm>.

15. Мілюкін М.В. Закономірності дисперсно-фазового розподілу органічних екотоксикантів у воді річкових систем світу / М.В. Мілюкін, М.В. Горбань // *Методы и объекты химического анализа*. – 2022. – Т. 17, № 3. – С. 133–140.

<https://doi.org/10.17721/moca.2022.133-140> [Q4]

16. Milyukin M., Gorban M. Investigation of the dispersed-phase distribution of organochlorine pesticides, polychlorinated biphenyls and polycyclic aromatic hydrocarbons in natural water systems. *Chemistry and Chemical Technologies (Chem. Chem. Technol.)*, 2023, Vol. 17, No. 4, pp. 846–856. <https://doi.org/10.23939/chcht17.04> [Q3]

17. Milyukin M.V., Gorban M.V. Concentrations of organochlorine pesticides and polychlorinated biphenyls in surface water of the Dnieper river. *Methods Objects Chem. Anal.* 2024. Vol. 19 (4), P. 241–249. <https://doi.org/10.17721/moca.2024.241-249> [Q4]

#### Література 4

##### ICP-MS

1) Thomas Robert. *A Practical Guide to ICP-MS*. Marcel Dekker, Inc. New York, USA; Basel, Switzerland. 2004. 324 p. CRC Press

2) Thomas Robert. *A Beginner's Guide to ICP-MS. Spectroscopy Tutorial*. 2001.  
<https://www.researchgate.net/publication/201170204>

3) Howard E. Taylor. *Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry, Practices and Techniques*. Academic Press: San Diego. 2001. 294 p.

4) Simom M. Nelms (Ed.). *Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry Handbook*. Blackwell Publishing. Oxford, CRC Press Inc. 2005. 485 p.

5) Steve J. Hill (Ed.). *Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry and its Applications*. Blackwell Publishing. 2006. 427 p.

6) Akbar Montaser (Ed.). *Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry*, Wiley. 1998. 1012 p.

7) Wilschefski S.C., Baxter M.R. Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry: Introduction to Analytical Aspects. *Clin. Biochem. Rev.* Vol. 40 (3). 2019. P. 115–133. <https://doi.org/10.33176/AACB-19-00024>

8) Agilent 7500 Series ICP-MS Tuning and Application Handbook G3270-90130. Agilent Technologies, Inc. 2006.

9) Agilent 7500 Series ICP-MS Chemstation (G 1834 B) Operator's G3270-90113 Manual. Agilent Technologies, Inc. 2006.

10) Edmond de Hoffman, Vincent Stroobant. Mass Spectrometry, Principles and Applications. 3rd Edition, Wiley, 2007. 512 p.

11) Daniel Proöfrock, Andreas Prange. Inductively Coupled Plasma-Mass Spectrometry (ICP-MS) for Quantitative Analysis in Environmental and Life Sciences: A Review of Challenges, Solutions, and Trends. *Applied Spectroscopy*. 2012. P. 843–868. DOI: 10.1366/12-06681

## 7. ПИТАННЯ ЕКЗАМЕНАЦІЙНИХ БІЛЕТІВ

### 1. Контрольні запитання

1. Суть методу молекулярно-абсорбційного аналізу.
2. Основний закон світлопоглинання (закон Бугера-Ламберта-Бера). Математичний висновок кінцевий формули закону Бугера-Ламберта-Бера.
3. Як використовують основний закон світлопоглинання в хімічному аналізі?
4. Що являють собою величини оптичної густини та світлопропускання? Як вони пов'язані між собою? В яких межах змінюються ці величини?
5. Які причини відхилення оптичної густини розчинів від закону Бугера-Ламберта-Бера?
6. Що таке молярний коефіцієнт світлопоглинання? Який його фізичний зміст? Як впливає величина молярного коефіцієнта світлопоглинання на чутливість фотометричного визначення?
7. Перерахувати хімічні та інструментальні фактори обмеження лінійності закону Бугера-Ламберта-Бера та проаналізувати їх причини.

### Пояснення

[Причини нелінійності включають:

1. Відхилення коефіцієнтів поглинання при високих концентраціях ( $>0,01$  М) через електростатичну взаємодію між молекулами, що знаходяться в безпосередній близькості.
2. Розсіювання світла через частинки в зразку.
3. Флуоресценція або фосфоресценція зразка.
4. Зміни показника заломлення при високій концентрації аналіту.
5. Зрушення хімічних рівноваг як функція концентрації.
6. Немонохроматичне випромінювання, відхилення можна мінімізувати, використовуючи відносно плоску частину спектра поглинання, таку як максимум смуги поглинання.
7. Розсіяне світло.]

### 2. Контрольні запитання

1. Навести граничні випадки взаємодії аналіту з поверхнею.
2. Якими факторами визначається час утримування речовини?
3. Яким чином вимірюють висоту хроматографічного піку?
4. Назвіть фактори, які впливають на ефективність.
5. Навести методи розрахунку ефективності, вираженої числом теоретичних тарілок.

6. Що це таке коефіцієнт розмивання і як його розраховують?

7. Наведіть способи розрахунку критерію розділення (роздільної здатності).

8. Типи ізотерм адсорбції. Поясніть їх форму.

9. Чим відрізняються рівняння Губера та Нокса від рівняння Ван-Деемтера?

10. При хроматографуванні розчину компонента А об'ємом 1 мкл за різних швидкостей потоку в колонці довжиною 20 см отримані наступні дані: об'ємна швидкість потоку, мл/хв – 2,52, 2,33, 1,56, 1,03, 0,54;  $t_0$ , хв – відповідно дорівнює 0,18, 0,49, 0,74, 0,89, 1,24;  $t_R$ , хв – відповідно дорівнює 5,49, 6,37, 7,17, 7,62, 8,62; ширина піків  $W$ , хв – відповідно дорівнює 0,15, 0,19, 0,23, 0,27, 0,34. Обчисліть число теоретичних тарілок та ВЕТТ для кожної об'ємної швидкості потоку, побудуйте залежність ВЕТТ від об'ємної швидкості та з графіка визначіть оптимальну швидкість. У розрахунках використовуйте виправлений час утримування  $t_R$ .

11. Для трьох речовин А, В та С на колонці, з  $N = 1000$ , отримані такі фактори утримування:  $k'_A = 1,41$ ,  $k'_B = 1,88$ ,  $k'_C = 2,96$ . Чи буде повним розділення цих речовин ( $R_S > 1$ )?

12. Розрахувати ефективність колонки (число теоретичних тарілок), якщо  $t_R = 6,50$  хв,  $w_{0,5} = 0,24$  хв,  $W = 0,42$  хв.

13. Розрахувати висоту, що еквівалентна теоретичній тарілці (ВЕТТ), якщо  $L = 10$  см,  $N = 4084$ .

14. Розрахувати приведену висоту, що еквівалентна теоретичній тарілці (ПВЕТТ), якщо  $L = 20$  см,  $N = 5040$  (1 приклад),  $L=10$  см,  $N=4084$  (2 приклад), діаметр зерен сорбенту 5 мкм та 3 мкм.

15. На ВЕРХ для біфенілу та диетилфталату отримали часи утримування 3,33 та 2,97 хв і ширину піків при основі відповідно 0,15 та 0,14 хв. Пік компонента, який не утримується, виходить за 0,41 хв. Обчислити коефіцієнт розділення та критерій розділення піків, а саме:  $N$ ,  $\alpha$ ,  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $R_S$ .

16. Обчислити параметри розділення (роздільної здатності)  $R_S$  піків на хроматограмі, які були отримані при наступних умовах:

- 1)  $\alpha = 1,138$ ,  $N_2 = 10000$ ,  $k_2' = 0,3$ ;
- 2)  $\alpha = 1,8$ ,  $N_2 = 100$ ,  $k_2' = 5,0$ ;
- 3)  $\alpha = 1,8$ ,  $N_2 = 10000$ ,  $k_2' = 5,0$ ;
- 4)  $\alpha = 1,024$ ,  $N_2 = 20000$ ,  $k_2' = 5,0$ .

Представити розрахунки значень  $R_S$  для кожного варіанту. Вибрати найкращі умови розділення компонентів із чотирьох варіантів.

### 3. Контрольні запитання

1. Проаналізуйте нормально-фазовий тип утримування в нормально-фазовій хроматографії та в гідрофільній хроматографії.

2. Проаналізуйте типи фізико-хімічних взаємодій в обернено-фазовій хроматографії.

3. Проаналізуйте типи фізико-хімічних взаємодій в лігандообмінній хроматографії.

4. Проаналізуйте типи фізико-хімічних взаємодій в квазі-нормально-фазовій хроматографії.
5. Проаналізуйте застосування ексклюзійної та іон-ексклюзійної хроматографії.
6. Проаналізуйте іон-парні режими хроматографії.
7. Проаналізуйте особливості міцелярної хроматографії.
8. Критично розглянути типи фізико-хімічних взаємодій: диполь-дипольні, диполь-польові, дисперсійні, сольвофобні, іон-іонні, іон-дипольні, кординаційні, водневі зв'язки,  $\pi$  -  $\pi$  взаємодії та оцінити їх вплив на розділення компонентів.
9. Оцінити внесок механізмів утримування з фізико-хімічними властивостями адсорбатів (дипольний момент, коефіцієнт розподілу в системі «октанол-вода», «ефективна» густина заряду йону, константа стійкості комплексів, енергія переходу в  $\pi$ -комплекс адсорбата з нерухомою фазою, ефективний розмір молекули).
10. Надати аналіз впливу природного середовища на дисперсно-фазовий розподіл сполук на прикладі органічних екотоксикантів ХОП, ПХБ, ПАВ (на основі сучасної літератури).

#### 4. Контрольні запитання

Оцінити переваги та недоліки загальних і селективних детекторів, які використовують для визначення та (або) моніторингу органічних і неорганічних екотоксикантів в об'єктах водних систем із застосуванням газової та високоефективної рідинної хроматографії (ГХ, ВЕРХ), а також гібридних методів (ГХ/МС, ГХ/МС/МС, ВЕРХ/МС, ВЕРХ/МС, ВЕРХ/МС/МС/МС/МС) та ІЗП/МС (ICP-MS). Особливу увагу приділити методам флуоресцентного, мас-селективного та електрохімічного детектування для аналізу та моніторингу водних систем (вода, донні відкладення, гідробіонти). У рефераті навести релевантну літературу на використання цих методів детектування, аналізу та моніторингу (РЕФЕРАТ).