

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

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«20» мая 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Теоретические основы экспериментальных методов в науке о полимерах

Уровень высшего образования:

Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Высокомолекулярные соединения

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С. Способен решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	ОПК-1.С.1. Воспринимает информацию химического содержания, систематизирует и анализирует ее, оценивает актуальность и степень новизны данных	Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
СПК-1.С Владеет современными теоретическими и экспериментальными методами исследования высокомолекулярных соединений и материалов на их основе, способен использовать эти методы при решении задач в профессиональной деятельности	СПК-1.С.2 Предлагает возможные экспериментальные методы изучения полимерных систем при решении поставленной задачи	Знать: Общие принципы экспериментальных методов исследования полимеров как способ получения детальной информации об их строении, свойствах и молекулярных характеристиках Знать: теоретические основы методов исследования полимеров и принципы их конструирования Уметь: осмысленно решать конкретные лабораторные задачи с использованием новых и разнообразных методов исследования полимеров Владеть: Теоретическими основами методов исследования полимеров численными методами моделирования полимерных систем

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 2зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 42 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 30 часов составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

знать: основы общей и физической химии, математической статистики и теории вероятностей, механики;

уметь: анализировать графики и строить их по заданным аналитическим функциям;

владеть: общими методами аналитического и физического эксперимента.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов.п.	Всего
Гель-проникающая хроматография (ГПХ)		2	2				4	3		
Светорассеяние		2	2				4	3		
ИК-спектроскопия		2	2				4	3		
Флуоресцентные методы		2	2				4	3		
Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)		1	1				2	1		
Рентгеноструктурный анализ (РСА)		2	2				4	3		
Термический анализ		2	2				4	3		
Методы исследования механических свойств полимеров		2	2				4	3		

Сканирующая зондовая микроскопия		1	1				2	2		
Электронная микроскопия		2	2				4	3		
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>				2		4	6		3	
Итого	72	18	18	2		4	42	27	3	30

6. Образовательные технологии:

- Создание кратких презентаций и оформление стендовых сообщений по выбранным тематикам
- Включение студентов в проектную деятельность,
- Дискуссии,
- Использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса.

7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

Основная литература

1. Методические пособия по теоретическим основам экспериментальных методов на сайте кафедры <http://vmsmsu.ru/what.html>

Дополнительная литература

1. Беленький Б.Г., Виленчик Л.З. «Хроматография полимеров». М.: 1978.
2. П.Д.Жен. Идеи скейлинга в физике полимеров. М.: Мир, 1982. 368 с.
3. Дехант И., Данц Р., Киммер В., Шмольке Р., Инфракрасная спектроскопия полимеров, Учебник М.: Химия, 1976.
4. Основы аналитической химии. Ю.А. Золотов, Е.Н. Дорохова, В.И. Фадеева и др. М.: Высш. шк., 2002.
5. Эллиот А., Инфракрасные спектры и структура полимеров, Учебник М.: Мир, 1972.
6. Паркер С. Фото-люминесценция растворов, Мир, 1972, 512 с.
7. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии, Мир, 1986, 496 с.
8. Вертц Дж., Болтон Дж. Теория и практические приложения метода ЭПР, М.: Мир, 1975.
9. P.N.Rieger. Electron Spin Resonance. Analysis and Interpretation. Cambridge: The Royal Society of Chemistry, 2007, 186 p.

10. Хохлов А.Р., Кучанов С.И. Лекции по физической химии полимеров. М.: Мир, 2000.,192 с.
11. А. Тобольский Структура и свойства полимеров М.: Химия, 1964.
12. А.А. Аскадский, А.Р. Хохлов. Введение в физико-химию полимеров. М.: Научныймир, 2009.
13. Д.Х.Джейл. Полимерные монокристаллы. Глава 2, 1968.
14. В.А.Берштейн, В.М.Егоров. Дифференциальная сканирующая калориметрия в физикохимии полимеров. Л.:Химия, 1990.
15. Ю.К.Годовский. Теплофизические методы исследования полимеров. М.:Химия, 1976.
16. В.А. Каргин, Г.Л. Слонимский. Краткие очерки по физико-химии полимеров. М.: Химия., 1967
17. В.Н. Кулезнев, В.А. Шершнев Химия и физика полимеров. М.:Высш. шк., 1988.
18. [С. Л. Баженов, А. А. Берлин, А. А. Кульков, В. Г. Ошмян](#). Полимерные композиционные материалы. Долгопрудный: Интеллект, 2010.
19. Большакова А.В., Киселева О.И., Никонорова Н.И., Яминский И.В. Сканирующая зондовая микроскопия блоксополимеров/. Учебное пособие, описание задачи лабораторного практикума — М.: Центр перспективных технологий, 2011, 25 с.
20. Г.Шиммель. Методика электронной микроскопии. Главы 5,6, 1972.
21. Справочник по микроскопии для нанотехнологии. Под ред. Нан Яо, Чжун Лин Ван. – М.: Научный мир, 2011, 712 с.
22. P. Eaton, P. West. Atomic force microscopy, Oxford University Press, 2010. ISBN: 978-0199570454.
23. Миронов В.Л Основы сканирующей зондовой микроскопии. М/: Техносфера, 2004
24. Пытьев Ю. П., Шишмарев И. А. Курс теории вероятностей и математической статистики для физиков : Учеб. пособие. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983. — 256 с.
25. Колмогоров А. Н., Журбенко И. Г., Прохоров А. В. Введение в теорию вероятностей : - М., Наука, 1982. - 160 с. - Библ-ка "Квант". Выпуск 23
26. Булинский А. В., Ширяев А. Н. Теория случайных процессов : - М., ФИЗМАТЛИТ, 2005. - 408 с.
27. Худсон Д. Статистика для физиков, лекции по теории вероятностей и элементарной статистике: - М., МИР, 1970. – 295 с.
28. Ширванянц Д.Г., Халатур П.Г. Компьютерное моделирование полимеров : - Учеб. пособие. – Тверь :Твер. гос. ун-т, 2000. – 156 с.
29. Kremer K., Grest G.S. Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulation in Polymer Science: Ed. K. Binder New York : Oxford University Press, 1995. P. 194.

Интернет-ресурсы

1. vmsmsu.ru
2. <http://learn.femtoscanonline.com> – задачи дистанционного практикума по теме «Сканирующая зондовая микроскопия» на русском и английском языках.
3. <http://www.femtoscanonline.com/wiki/ru/start> - описание ПО для обработки данных микроскопии «ФемтоСкан Онлайн»
4. <http://www.youtube.com/femtoscanonline> - видео уроки по обработке микроскопических данных ПО «ФемтоСкан Онлайн»
5. <http://www.nanoscopy.org/Applications.shtml> - настройка обратной связи в СЗМ в онлайн режиме на весовой модели зондового микроскопа/ Методические указания к лабораторным занятиям

Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (фломастерами)

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

к.х.н., старший научный сотрудник Гарина Елизавета Семеновна, кафедра высокомолекулярных соединений химического факультета МГУ.

к.х.н., доцент Литманович Екатерина Аркадьевна, кафедра высокомолекулярных соединений химического факультета МГУ

к.х.н., доцент Спиридонов Василий Владимирович, кафедра высокомолекулярных соединений химического факультета МГУ.

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Зезин Сергей Борисович, кафедра высокомолекулярных соединений химического факультета МГУ.

к.х.н., старший научный сотрудник Гроховская Татьяна Евгеньевна, кафедра высокомолекулярных соединений химического факультета МГУ

к.х.н., старший научный сотрудник Ефимов Александр Валерьевич, кафедра высокомолекулярных соединений химического факультета МГУ

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Большакова Анастасия Владимировна, кафедра высокомолекулярных соединений химического факультета МГУ

к.х.н., доцент Ефимова Анна Александровна, кафедра высокомолекулярных соединений химического факультета МГУ.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачёта. На зачёте проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

- контрольных вопросов;

1. Полимерный образец на 99% по массе состоит из макромолекул с молекулярной массой 100000, но содержит 1% макромолекул с молекулярной массой 100. Рассчитайте коэффициент полидисперсности M_w/M_n образца.
2. Рассчитайте теоретическую среднечисловую молекулярную массу M_n полистирола ($m_0 = 104$ г/моль), полученного псевдоживой радикальной полимеризацией, которая прошла до степени превращения мономера, равной 0.04. Начальная концентрация $[M]_0$ стирола равна 8.7 моль/л, начальная концентрация инициатора $[I]_0$ равна 10^{-3} моль/л.
3. В результате ГПХ-анализа получено ММР полиметилметакрилата, синтезированного радикальной полимеризацией с обрывом цепей путем как рекомбинации, так и диспропорционирования. ММР представляет собой распределение Шульца, для которого $M_z:M_w:M_n = (k+3):(k+2):(k+1)$. Найдите интервал возможных значений параметра k .
4. Измерение размеров макромолекул методами статического и динамического светорассеяния.
5. Как определить θ -температуру раствора полимера методом светорассеяния?
6. Как и почему метод светорассеяния позволяет определить термодинамическое качество растворителя?
7. Приведите факторы, влияющие на следующие характеристики ИК-спектров: интенсивность, ширина линии.
8. Каковы особенности ИК-спектроскопии полимеров в сравнении с низкомолекулярными веществами?
9. Понятие о люминесценции, флуоресценции и фосфоресценции. Диаграмма Яблонского.
10. Положение спектров эмиссии и поглощения, правило зеркальной симметрии, закон Стокса
11. Как влияет длина волны возбуждающего света на положение спектра и интенсивность флуоресценции? Спектр возбуждения и его использование в аналитических целях

12. Время жизни возбужденного состояния, статическое и динамическое тушение
13. Какие изменения в распределении неспаренных электронов по энергетическим уровням происходят при помещении парамагнитного вещества в постоянное магнитное поле? Что изменится при дополнительном наложении на эту систему еще и электромагнитного излучения?
14. Какую информацию о парамагнитном веществе можно получить, изучая его спектр ЭПР?
15. Что такое сверхтонкая структура спектра ЭПР?
16. При каких условиях возможно наблюдение дифракции?
17. Понятие о пространственной решетке, элементарной ячейке и пространственной структуре.
18. Приведите дифракционные картины от монокристаллических образцов, поликристаллических образцов, аморфных веществ.
19. Как оценить степень ориентации кристаллитов?
20. Определение параметров решетки кристаллитов методом РСА.
21. Чем отличаются фазовые переходы 1-ого и 2-ого рода? Примеры фазовых переходов.
22. Какими методами термического анализа можно определить T_c полимера? Нарисуйте примеры кривых, полученных этими методами.
23. Принцип устройства термомеханического анализатора. Какие свойства полимеров можно изучать с помощью ТМА?
24. Какие сведения о полимерах можно получить с помощью термогравиметрического анализа?
25. Модуль упругости сшитого каучука при температуре 20°C составляет 0.1 МПа. Рассчитайте молекулярную массу отрезка цепи между сшивками.
26. Сшитый каучук характеризуется молекулярной массой отрезка цепи между сшивками 10000 г/моль. Чему будет равен модуль упругости каучука при температуре 20°C ?
27. При растяжении ориентированного волокна изотактического полипропилена диаметром 0, 2 мм получены следующие значения нагрузки в зависимости от величины относительной деформации полимера:
 - 0.5% - 0.1 кг
 - 1% - 0.2 кг
 - 1.5% - 0.3 кг
 - 2% - 0.4 кг
 - 4% - 5 кг
 - 10% - 10 кгОпределить модуль упругости волокна.
28. Пластику аморфного полистирола толщиной 0.1 мм, шириной 20 мм растягивали при комнатной температуре. Удлинение образца при разрыве составило 0.5 мм, нагрузка при разрыве равна 10 кг. Определите прочность образца полистирола и значение относительного удлинения при разрушении образца.
29. Опишите методы нанолитографии на полимерных материалах с использованием сканирующей зондовой микроскопии. Какие полимеры наилучшим образом подходят для записи информации?
30. Какую информацию позволяют получить сканирующая резистивная, электростатическая и кельвиновская микроскопия при изучении проводящих полимеров?
31. Каковы основные возможности и достижения сканирующей зондовой микроскопии в изучении биополимеров и биомакромолекул? Какие подложки наиболее часто используются для нанесения биологических объектов?

32. Что такое сканирующая силовая микроскопия полимерных молекул? Какую силу надо приложить, чтобы разорвать одну полимерную молекулу? Как осуществить эксперимент по растяжению и разрыву молекулы ДНК?
33. Нарисуйте принципиальную схему формирования изображения в СЭМ
34. Перечислите основные методы приготовления образцов для ПЭМ
35. В чем сущность явления сферической аберрации?
36. Какие требования к образцу предъявляются для изучения его методами ПЭМ и СЭМ?
37. Разрешающая способность микроскопа и разрешение изображения – в чем разница?

Вопросы к зачету

1. Как определить молекулярную массу полимера методом статического светорассеяния.
2. Какую информацию и каким образом можно получить методом динамического светорассеяния?
3. Какую информацию о полимерах позволяет получать метод ИК-спектроскопии?
4. Использование метода флуоресценции для исследования полимеров.
5. Какие объекты и процессы исследуют методом ЭПР?
6. Понятие интерференции волн.
7. Понятие дифракции волн.
8. Формула Вульфа-Брэгга.
9. Какие процессы, происходящие в полимерах, можно изучать с помощью методов термического анализа?
10. Как определить модуль упругости полимера?
11. Какими методами можно определить температуру стеклования полимера?
12. Термомеханические кривые линейных и сшитых полимеров.
13. Термомеханические кривые аморфизованных полимеров.
14. В каких единицах измеряются модуль упругости материала, прочность, относительное удлинение при разрыве?
15. Метод сканирующей зондовой микроскопии.
16. Какую информацию о полимере можно получить, используя метод сканирующей электронной микроскопии?
17. Какую информацию можно получить методом просвечивающей электронной микроскопии?
18. Какую информацию можно получить методом сканирующей электронной микроскопии?
19. Основные направления использования компьютерной техники в профессиональной деятельности научного сотрудника-химика. Классификация этапов развития функциональных возможностей компьютеров.
20. Анализ результатов эксперимента. Проверка теоретических значений и зависимостей. Учет ошибок измерений.
21. Экспериментальные ошибки, причины их возникновения. Классификации ошибок измерения по их свойствам и способам представления. Способы учета и уменьшения ошибок. Теоретический предел точности измерения.
22. Случайная ошибка как случайная величина. Функция плотности вероятности и ее основные свойства. Функция плотности вероятности случайной ошибки.
23. Математическое ожидание и дисперсия случайной величины, способы их определения. Связь математического ожидания и дисперсии с измеряемым значением и его ошибкой. Прямая и обратная задача.
24. Метод наименьших квадратов (МНК), его принцип и обоснование. Линейные и нелинейные задачи. Линеаризация. Взвешенный метод наименьших квадратов (ВМНК). Использование ВМНК при анализе разнородных по точности данных. Проверка гипотез.

25. Численные методы решения некоторых вычислительных задач. Решение нелинейных уравнений и систем уравнений. Численное интегрирование и дифференцирование. Сплайн-сглаживание.
26. Численные эксперименты и компьютерное моделирование, их понятие и основные принципы. Усреднение по времени и по ансамблю. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло.
27. Основные требования, предъявляемые к компьютерным моделям. Решеточные и континуальные модели. Периодические граничные условия. Способы создания начальных конфигураций и их дальнейшая модификация.

Расчетные задачи или тесты

1. Какой из закристаллизованных полимеров имеет наиболее высокую температуру плавления: полиэтилен (ПЭ), полипропилен (ПП), изотактический полистирол (ПС) или 1,4 - цис - полиизопрен (НК), если величины теплот плавления (H) и энтропий плавления (S) (в расчете на мономерное звено) равны:
 для ПЭ $H = 288$ дж/г, $S = 19,3$ дж/моль.К,
 для ПП $H = 240$ дж/г, $S = 22,3$ дж/моль.К,
 для ПС $H = 81$ дж/г, $S = 16$ дж/моль.К,
 для НК $H = 65$ дж/г $S = 14,7$ дж/моль.К ?
2. Модуль упругости эластомера, характеризующегося величиной отрезка молекулярной цепи между узлами химической сетки $M_c = M$, равен E_1 . Чему равен модуль упругости эластомера, если $M_c = 3M$?
3. Полимерный образец на 99% по массе состоит из макромолекул с молекулярной массой 100000, но содержит 1% макромолекул с молекулярной массой 100. Рассчитайте коэффициент полидисперсности M_w/M_n образца.
4. Полимер состоит на 90% (по весу) из молекул с молекулярной массой $M = 50000$ и на 10% (по весу) из молекул с $M = 200000$. Какова средняя молекулярная масса этого полимера, если они определялись методами светорассеяния?

Вопросы:

1. Какую информацию можно получить при использовании малоуглового рассеяния рентгеновских лучей: А. о параметрах кристаллической решетки, Б. о конформации макромолекул, В. о размерах элементов надмолекулярной структуры полимеров?
2. Позволяет ли метод калориметрического исследования полимеров определить: А. размеры надмолекулярных структур, Б. параметры кристаллической решетки полимеров, В. величины теплот плавления и кристаллизации полимеров, Г. степень ориентации макромолекул в образце полимера?
3. Какой полимер: полистирол (ПС), изотактический полипропилен (ПП), изопреновый каучук (НК) или полиэтилентерефталат (ПЭТФ) характеризуется наибольшей величиной деформации при 0 град. Ц (при воздействии одной и той же нагрузки), если температуры стеклования (T_c) полимеров: T_c (НК) = - 50, T_c (ПЭТФ) = 60, T_c (ПС) = 100, а T_c (ПП) = 0 град.Ц ?
4. К образцу из слабо сшитого каучука подвешен груз весом, равным 0,1 величины разрывного напряжения. Система находится в равновесии. Что произойдет с грузом при нагревании образца? 1) поднимется, 2) положение груза не изменится, 3) опустится
 4) сначала опустится, а затем поднимется

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: Общие принципы экспериментальных методов исследования полимеров как способ получения детальной информации об их строении, свойствах и молекулярных характеристиках Знать: теоретические основы методов исследования полимеров и принципы их конструирования	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Уметь: осмысленно решать конкретные лабораторные задачи с использованием новых и разнообразных методов исследования полимеров	Разбор кейсов
Владеть: Теоретическими основами методов исследования полимеров и численными методами моделирования полимерных систем Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете