МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.

_____ "___" _____20___ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Структурно-динамические свойства конденсированных сред Б1.В.ДВ.5

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика
Профиль подготовки: Физика конденсированного состояния
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский

Автор(ы):

Скирда В.Д.

Рецензент(ы):

Тагиров Л.Р.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Скирда В. Д.
Протокол заседания кафедры No ___ от "____" _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Института физики:
Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__г

Регистрационный No 6151117

Казань
2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) заведующий кафедрой, д.н. (профессор) Скирда В.Д.
Кафедра физики молекулярных систем Отделение физики , Vladimir.Skirda@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

изучить основные подходы и модели в исследованиях структуры и динамики молекул в полимерных, гетерогенных, включая биологические, и пористых системах на основе данных ЯМ-релаксации и самодиффузии.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.5 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 03.04.02 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

Для освоения данной дисциплины требуются знания обучающегося, приобретенные при изучении общего курса физики, дисциплин "Физические свойства и динамика молекул", "физика полимеров", "ЯМР", "Структурно-динамические свойства и методы исследования вещества".

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	способность демонстрировать углубленные знания в области математики и естественных наук
ОК-5 (общекультурные компетенции)	способность порождать новые идеи (креативность)
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способность использовать знания современных проблем физики, новейших достижений физики в своей научно-исследовательской деятельности
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способность и готовностью применять на практике навыки составления и оформления научно-технической документации, научных отчетов, обзоров, докладов и статей (в соответствии с профилем магистерской программы)
ПК-7 (профессиональные компетенции)	ПК-7 способность свободно владеть профессиональными знаниями для анализа и синтеза физической информации (в соответствии с профилем подготовки)

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

понимать основные результаты по трансляционной динамике молекул и макромолекул в наиболее представительных классах молекулярных систем (полимерных, гетерогенных и т.д.);

2. должен уметь:

сопоставлять различные характеристики молекулярной системы, полученные либо разными методами, либо разными методиками в пределах одного метода;

3. должен владеть:

навыками анализа первичных экспериментальных результатов и их сопоставления с теоретическими расчетами или моделями.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

рассматривать экспериментальные данные и теоретические подходы во взаимосвязи;

критически относиться к имеющимся в литературе подходам;

выстраивать логику доказательств и обоснований той или иной гипотезы с максимально полным анализом альтернативных вариантов;

организовать и планировать физические исследования;

самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики (в соответствии с профилем магистерской программы) и решать их с помощью современной аппаратуры, оборудования, информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Структура и динамика молекул в растворах и расплавах полимеров	3	1-4	3	4	0	Презентация Дискуссия
2.	Тема 2. Особенности молекулярной подвижности и надмолекулярной структуры в трехмерных макромолекулярных системах	3	5-8	3	2	0	Презентация Устный опрос
3.	Тема 3. Динамика в многофазных системах с фазовым расслоением	3	9-11	2	2	0	Дискуссия Презентация

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Фазовое состояние и динамика молекул в ограниченных средах	3	12-17	4	4	0	Контрольная работа
5.	Тема 5. Особенности структурно-динамических характеристик в биосистемах	3	18	2	0	0	Презентация
.	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	Зачет
	Итого			14	12	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Структура и динамика молекул в растворах и расплавах полимеров

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Методы измерения/исследования структурно-динамических характеристк. Метод ЯМР в исследованиях структуры и динамики. Самодиффузия молекул растворителя в разбавленных растворах. Поведение молекул растворителя в растворах полимеров. Структура и молекулярное движение в пластифицированных полимерах. Флуктуационно-кооперативный характер трасляционной подвижности гибкоцепных линейных макромолекул. Форма диффузионного затухания для макромолекул в растворах и расплавах полимеров. Концепция динамических кластеров. Теория динамического скейлинга и эксперимент. Универсальная концентрационная зависимость коэффициентов самодиффузии линейных гибкоцепных макромолекул. Универсальная молекулярно-массовая зависимость коэффициентов самодиффузии макромолекул. Сравнение экспериментальных данных с моделью рептационного движения полимерной цепи.

практическое занятие (4 часа(ов)):

1. Исследование формы диффузионного затухания и ее зависимости от времени диффузии для раствора (или расплава) бинарной смеси полимеров. 2. Исследование формы диффузионных затуханий и определение значений средних коэффициентов самодиффузии молекул растворителя и полимера для растворов полимера разных концентраций. 3. Вычисление и построение концентрационных зависимостей эффективных коэффициентов самодиффузии макромолекул путем нормировки экспериментально измеренных данных на локальную подвижность по данным ядерной релаксации.

Тема 2. Особенности молекулярной подвижности и надмолекулярной структуры в трехмерных макромолекулярных системах

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Особенности трансляционной динамика макромолекул, образующих трехмерную структуру. Аномальный коэффициент самодиффузии и его связь с характерным масштабом ограничений. Трансляционной подвижности макромолекул на масштабах меньших размера клубка (кластера). Гипотеза о возможности проявления спиновой диффузии. Трансляционная динамика молекул и процессы гелеобразования. Полиэлектролитные гели.

практическое занятие (2 часа(ов)):

1. Анализ диффузионных затуханий и средних коэффициентов самодиффузии в зависимости от времени диффузии в гелеобразующих системах с построением необходимых графиков.

Тема 3. Динамика в многофазных системах с фазовым расслоением

лекционное занятие (2 часа(ов)):

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Самодиффузия и фазовое расслоение. Особенности температурных зависимостей. Фазовое расслоение в системах с пространственными ограничениями. Динамика молекул и процессы кристаллизации в полимерных системах.

практическое занятие (2 часа(ов)):

1. Исследование характеристик молекулярной подвижности в частично кристаллических системах на примере полиэтиленгликоля. Определение степени кристалличности.

Тема 4. Фазовое состояние и динамика молекул в ограниченных средах

лекционное занятие (4 часа(ов)):

Вводные замечания. Типичные зависимости для самодиффузии в системе ограничений. Скейлинговый подход к анализу зависимости коэффициентов самодиффузии от времени диффузии. Влияние размера молекул на самодиффузию в нанопористых системах. Процессы обмена газ/жидкость в системах с частичным заполнением пористого пространства молекулами жидкости. Влияние размера молекул на самодиффузию в нанопористых системах. Пористая среда, как условие изучения структурно-динамических свойств молекулярной системы. Изучение предпереходных явлений в нематических жидкостях. Эффект пористой среды.

практическое занятие (4 часа(ов)):

1. Проверка работоспособности скейлингового подхода для оценки характеристик пористой среды на примере исследования водонасыщенного керна.

Тема 5. Особенности структурно-динамических характеристик в биосистемах

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Общие замечания о структуре и динамике в биологических системах. Трансляционная динамика молекул в растворах белков. Процессы самоорганизации. Градиентный ЯМР в исследованиях модельных биологических мембран. Исследования латеральной диффузии. Механизм свертываемости крови по данным структурно-динамических исследований плазмы крови методом градиентного ЯМР.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Структура и динамика молекул в растворах и расплавах полимеров	3	1-4	подготовка к дискуссии	2	дискуссия
				подготовка к презентации	6	презентация
2.	Тема 2. Особенности молекулярной подвижности и надмолекулярной структуры в трехмерных макромолекулярных системах	3	5-8	подготовка к презентации	6	презентация
				подготовка к устному опросу	2	устный опрос
3.	Тема 3. Динамика в многофазных системах с фазовым расслоением	3	9-11	подготовка к дискуссии	4	дискуссия
				подготовка к презентации	6	презентация
4.	Тема 4. Фазовое состояние и динамика молекул в ограниченных средах	3	12-17	подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Особенности структурно-динамических характеристик в биосистемах	3	18	подготовка к презентации	10	презентация
	Итого				46	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

В процессе освоения данной дисциплины используются лекционные виды занятий, практические (как с использованием экспериментального оборудования, так и ориентированные на анализ предварительно полученного первичного экспериментального материала). В процессе проведения практик предполагается активное обсуждение результатов как с преподавателем, так и в форме докладов, выносимых на общее обсуждение. При таких обсуждениях будут использованы средства интерактивного общения. Обсуждение вопросов, имеющих значимый познавательный потенциал будет проводиться в форме дискуссий и обсуждения презентаций.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Структура и динамика молекул в растворах и расплавах полимеров

дискуссия , примерные вопросы:

1. Методы исследования структурно-динамических свойств молекулярных систем. Преимущества и недостатки. 2. Как чувствует себя малая молекула в окружении макромолекул? Чем определяется энергия активации для молекул растворителя? 3. Какие характеристики макромолекул оказывают влияние на ее динамику? 4. Модель рептации. Логичность и противоречия.

презентация , примерные вопросы:

1. Концепция динамического скейлинга. Основные положения. 2. Обобщенные концентрационные и молекулярно-массовые зависимости. Теория и экспериментальные данные.

Тема 2. Особенности молекулярной подвижности и надмолекулярной структуры в трехмерных макромолекулярных системах

презентация , примерные вопросы:

1. Ааномальная диффузия. Признаки, механизмы, примеры 2. Особенности структурно-динамических свойств полимерных гелей по данным методов ЯМР.

устный опрос , примерные вопросы:

1. Можно ли методом градиентного ЯМР регистрировать сегментальную подвижность макромолекул? Если да, то при каких условиях? 2. Необходимые и достаточные признаки регистрации локальной или полулокальной диффузии полимерной цепи.

Тема 3. Динамика в многофазных системах с фазовым расслоением

дискуссия , примерные вопросы:

1. Структура молекулярной системы при фазовом разделении. 2. Что такое макрофазное и микрофазное расслоение? 4. Какие системы можно отнести к системам с фазовым расслоением и какие признаки в динамике молекул при этом ожидаются?

презентация , примерные вопросы:

1. Особенности температурных зависимостей времен релаксации коэффициентов самодиффузии в системах с фазовым расслоением. 2. Процессы молекулярного и спинового обмена в многофазных системах по данным ЯМР.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Тема 4. Фазовое состояние и динамика молекул в ограниченных средах

контрольная работа , примерные вопросы:

1. Скейлинговый подход к анализу зависимости коэффициентов самодиффузии от времени диффузии. Преимущества и недостатки в сравнении с другими подходами. 2. Особенности трансляционной подвижности молекул в пористых и нанопористых системах.

Тема 5. Особенности структурно-динамических характеристик в биосистемах

презентация , примерные вопросы:

1. Особенности формы диффузионных затуханий в суспензии эритроцитов крови человека. 2. Латеральная диффузия в моделях бислойных липидных мембран. Особенности измерения.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

1. Методы исследования структурно-динамических свойств молекулярных систем. Преимущества и недостатки.

2. Энергия активации подвижности молекул и макромолекул. Факторы, ее определяющие. Какие характеристики макромолекул оказывают влияние на ее динамику?

3. Трансляционная подвижность гибкоцепных макромолекул с позиций модели рептаций. Логичность и противоречия.

4. Обобщенные концентрационные зависимости коэффициентов самодиффузии. Учет характеристик локальной подвижности.

5. Обобщенные молекулярно-массовые зависимости макромолекул. Теория и экспериментальные данные.

6. Необходимые и достаточные признаки регистрации локальной или полулокальной диффузии полимерной цепи.

7. Что такое аномальная диффузия?

8. Назовите характерные признаки в динамике макромолекул, соответствующие состоянию трехмерной сетки (геля).

9. Структура и динамика молекулярной системы при фазовом разделении. Примеры и основные признаки.

10. Основные факторы влияния ограниченной геометрии на фазовое состояние и динамику молекул.

11. Процессы обмена газ/жидкость в пористых системах.

12. Особенности трансляционной динамики молекул в нанопористых системах.

13. Пористая среда, как условие регистрации формирования надмолекулярных структур.

14. Преимущества и недостатки скейлингового подхода к анализу зависимостей среднего коэффициента самодиффузии от времени диффузии в пористых средах.

15. Латеральная диффузия, понятие и методы регистрации.

16. Концентрационные зависимости коэффициентов самодиффузии белков. Влияние вторичной структуры.

Приведенный перечень вопросов направлен на тестирование овладения студентами компетенциями ОК-1 (способностью демонстрировать углубленные знания в области математики и естественных наук), ПК-2 (способность использовать знания современных проблем физики, новейших достижений физики в своей научно-исследовательской деятельности) и ПК-4 (способностью и готовностью применять на практике навыки составления и оформления научно-технической документации, научных отчетов, обзоров, докладов и статей (в соответствии с профилем магистерской программы)).

Проведение практических занятий по курсу и их контроль способствует овладению студентами профессиональными компетенциями ОК-5 (способность порождать новые идеи (креативность)) и ПК-7 (способностью свободно владеть профессиональными знаниями для анализа и синтеза физической информации (в соответствии с профилем подготовки)).

7.1. Основная литература:

1. Спектральные методы анализа. Практическое руководство : Учебное пособие / Васильева В.И., Стоянова О.Ф., Шкутина И.В., Карпов С.И. - 2014. - 416 стр. - Издание 1-ое. - ISBN 978-5-8114-1638-7. - Издательство "Лань". Электронно-библиотечная система. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=50168

2. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости / Федотов М.А. - 2010. - ISBN: 978-5-9221-1202-4. - 384 стр. - Издательство "Физматлит". Электронно-библиотечная система.

3. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости / Федотов М.А. - 2010. - ISBN: 978-5-9221-1202-4. - 384 стр. - Издательство "Физматлит". Электронно-библиотечная система.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=2151

7.2. Дополнительная литература:

1. Фазовые переходы полимерных систем во внешних полях : Учебное пособие / Вшивков С.А.- Издание 2-е, исправленное и дополненное .- 2013.- 368 стр. - ISBN 978-5-8114-1529-8. - Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=30431

2. Атомная физика. Теоретические основы и лабораторный практикум: Уч. пос. / В.Е.Граков, С.А.Маскевич и др.; Под общ. ред. А.П.Клищенко. - М.: ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2011. - 333с. http://znanium.com/bookread.php?book=218015#none

7.3. Интернет-ресурсы:

Diffusion NMR, User Manual, Bruker BioSpin, This manual was written by Klaus Zick This manual was edited by Stanley J. Niles ? December 2, 2009: Bruker Biospin GmbH Rheinstetten, Germany P/N: H9153 DWG-Nr.: 1453003 - http://www.rit.edu/cos/scms/pdf/500MHz-NMR/diffusion-manual.pdf

Fundamentals of NMR (Chapter 1) THOMAS L. JAMES (Department of Pharmaceutical Chemistry, University of California, San Francisco, CA 94143-0446 U.S.A.) - http://www.ias.ac.in/initiat/sci_ed/resources/chemistry/James.T.pdf

NMR Relaxation. Phenomenology and Experimental Considerations. Review of First-Order Rate Kinetics - https://wasatch.biochem.utah.edu/nmr/NMR%20Relaxation%20Basics.pdf

Solution Dynamics and Self-OrganizationProfessor, William S. Price - http://www.uni-leipzig.de/diffusion/powerpoint_presentations/pdf/price.pdf

ОСНОВЫ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА - http://ssrc.inp.nsk.su/CKP/lections/X-ray_structure_analysis.pdf

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Структурно-динамические свойства конденсированных сред" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB,audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудованием имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "Консультант студента" , доступ к которой предоставлен студентам. Электронная библиотечная система "Консультант студента" предоставляет полнотекстовый доступ к современной учебной литературе по основным дисциплинам, изучаемым в медицинских вузах (представлены издания как чисто медицинского профиля, так и по естественным, точным и общественным наукам). ЭБС предоставляет вузу наиболее полные комплекты необходимой литературы в соответствии с требованиями государственных образовательных стандартов с соблюдением авторских и смежных прав.

Установки ЯМР (ЯМР релаксометр, ЯМР-диффузометр, ЯМР спектрометр AVANCE 400 III tm).

Персональные компьютеры.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 03.04.02 "Физика" и магистерской программе Физика конденсированного состояния .

Автор(ы):
Скирда В.Д. _____
"__" _____ 201 __ г.

Рецензент(ы):
Тагиров Л.Р. _____
"__" _____ 201 __ г.