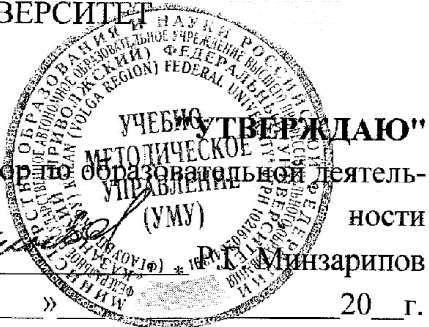


Федеральное государственное автономное образовательное
Учреждение высшего профессионального образования
КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Проректор по образовательной деятель-





ности

Минзарипов

« __ » 20__ г.

ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Структурно-динамические свойства молекулярных систем и методы исследования»

Цикл СД.ДС.Ф.10

Специальность: 010701.65 - Физика

Принята на заседании кафедры физики молекулярных систем

(протокол № 1 от "9" сентября 2014 г.)

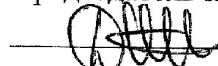
Заведующий кафедрой физики молекулярных систем

 (В.Д. Скирда)

Утверждена Учебно-методической комиссией института физики КФУ

(протокол № 4 от "11" сентября 2014 г.)

Председатель комиссии

 (Д.А. Таюрский)

Рабочая программа дисциплины “ Структурно-
динамические свойства молекулярных систем и
методы исследования ”

Предназначена для студентов 3 курса,
по специальности: Физика 01.07.01.65
(Название специальности)

АВТОР: Пименов Г.Г., Савинков А.В.

КРАТКАЯ АННОТАЦИЯ: в рамках дисциплины «Структурно-динамические свойства молекулярных систем и методы исследования» излагаются основы теории и методики инфракрасной спектроскопии, статического и динамического светорассеяния, рентгенографии для изучения строения и молекулярной подвижности полимерных систем.

1. Требования к уровню подготовки студента, завершившего изучение дисциплины “ Структурно-динамические свойства молекулярных систем и методы ”

наименование дисциплины

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины должны:

- знать основы методов и аппаратуру ИК-и ЯМР-спектроскопии, рентгенографии и светорассеяния
- уметь работать на инфракрасном спектрометре ИКС-22, релаксометре –ЯМР, диффузомере –ЯМР, самостоятельно проводить расшифровку ИК-спектров и обработку затухания поперечной и продольной намагниченности.

2. Объем дисциплины и виды учебной работы (в часах).

Форма обучения - очная

Количество семестров 1

Форма контроля:

2 семестр - экзамен

№	Виды учебных занятий	Количество часов	
		1 семестр	2 семестр
1.	Всего часов по дисциплине		200
2.	Самостоятельная работа		64
3.	КСР		51
3.	Аудиторных занятий		85
	в том числе лекций		51
	семинарских (или лабораторно-практических)		34

3. Содержание дисциплины.

3.1. ТРЕБОВАНИЯ ГОСУДАРСТВЕННОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО СТАНДАРТА К ОБЯЗАТЕЛЬНОМУ МИНИМУМУ СОДЕРЖАНИЯ ПРОГРАММЫ

Индекс	Наименование дисциплины и ее основные разделы	Всего часов
СД.ДС.Ф.10	Структурно-динамические свойства молекулярных систем и методы исследования	200

3.2. СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ

№ п/п	Название темы и ее содержание	Количество часов		
		лекции	(лаб.- практ.) занятия	само- стоя- тельная работа
1	Происхождение ИК-спектров и их краткая характеристика. Равновесная конфигурация. Колебательные координаты. Классификация колебаний.	2		4
2	Уравнение движений для колебаний многоатомной молекулы. Преобразование векового уравнения в естественные вековое уравнение. Нормальные координаты и колебания. Кинематические коэффициенты и их вычисление. Силовые постоянные. Учет свойства симметрии. Координаты симметрии на примере молекулы воды.	5	4	4
3	Уравнения Шредингера в нормальных координатах и его решение. Активность и интенсивность нормальных колебаний. Теория интенсивности.	4		2
4	Некоторые элементы теории групп. Группы симметрии и их обозначение. Приводимые и неприводимые представления. Характер матриц преобразования, свойства и их нахождение. Классификация волновых функций. по представлениям группы. Анализ активности переходов. Теоретико-групповой. анализ симметрии и активности колебаний молекул.	6	4	10
5	Колебания линейных регулярных макромолекул. Анализ симметрии и активности колебаний молекул полиэтилена. Колебания кристаллических решеток на примере кристаллического полиэтилена.	6	6	10
6	Методика ИКС. Устройство и работа спектрометра. ИК-спектрометры с Фурье-преобразованием. Полуколичественный, анализ групповых частот. Обработка ИК-спектров. Определение степени кристалличности и состава сополимеров. Применение ИКС к исследованию межмолекулярного взаимодействия, проницаемости полимеров, процессов химического сшивания, окисление и др. Поляризованная ПК-спектроскопия. Дихроичное отношение в ориентированных полимерах. Применение поляризованной ИКС к исследованию различных фазовых переходов в полимерах.	12	4	12
7	Широкоугольная рентгенография полимерных кристаллов. Определение параметров элементарной ячейки. Определение размеров кристаллитов: метод функции корреляции, метод ширины рефлексов. Определение степени кристалличности. Влияние ориентации полимеров на дифрактограммы. Малоугольная рентгенография. Особенности эксперимента. Теория Гинье для разбавленных систем. Определение размера рассеивающих частиц.	4		6
8	Времена продольной и поперечной магнитной релаксации в жидкостях, твердых телах и полимерных системах. Методы измерения T_1 и T_2 коэффициентов самодиффузии.	8	8	10
9	Устройство релаксометров и диффузометров ЯМР. Методика обработки сложных экспериментальных спадов продольной и поперечной намагниченности	6	8	6
	Итого часов:	51	34	64

Основная литература

1. Фазовые переходы полимерных систем во внешних полях : Учебное пособие / Вшивков С.А.– Издание 2-е, исправленное и дополненное .– 2013.– 368 стр. – Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=30431

2. Высокомолекулярные соединения : Учебник / Кленин В.И., Федусенко И.В. – Издание 2-ое исправленное. – 2013. – 512 стр. – ISBN: 978-5-8114-1473-4. Издательство «Лань». – Электронно-библиотечная система.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=5842

3. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / Каплан И.Г. пер. с англ. – Электронный ресурс. – 2012. – 394 стр. – ISBN: 978-5-9963-1385-3. Издательство "Бином. Лаборатория знаний". Электронно-библиотечная система.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=8690

Дополнительная литература

1. Основы квантовой механики : Учебник / Блохинцев Д.И. – 2004. – 672 стр. – Издание 7-ое. – ISBN: 978-5-8114-0554-1. – Издательство «Лань». Электронно-библиотечная система.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=619

2. Лекции по физике / Браже Р.А. – Издание 1-ое. – 2013. – ISBN: 978-5-8114-1436-9. – 320 стр. – Издательство «Лань». Электронно-библиотечная система.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=10248

Интернет ресурсы

1. American Institute of Physics, <http://scitation.aip.org/>.
2. Издательство Elsevier, <http://www.sciencedirect.com/>.
3. Научная электронная библиотека, <http://www.elibrary.ru>.
4. Электронная библиотека, <http://www.knigafund.ru/>.
5. Электронная библиотечная система, www.studmedlib.ru

Приложение к программе дисциплины
“ Структурно-динамические свойства молекулярных систем и методы исследования ”

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЕ БИЛЕТЫ

Билет 1

1. Уравнение движения для колебаний многоатомной молекулы.
2. Определение степени кристалличности и состава сополимеров.

Билет 2

1. Кинематические коэффициенты и их вычисление
2. Методика ИКС (приготовление объектов и обработка спектров).

Билет 3

1. Уравнение Шредингера в нормальных координатах и его решение.
2. Применение поляризованной ИКС к исследованию фазовых переходов в полимерах.

Билет 4

1. Анализ симметрии и активности колебаний молекул полиэтилена.
2. Устройство и работа спектрометра ИКС-22 (оптическая часть)

Билет 5

1. Устройство и работа двулучевого ИКС-22 (приемно-регистрирующая часть)
2. Колебания молекулы типа транс-дихлорэтилена.

Билет 6

1. Дихроичное отношение в одноосноориентированных полимерах.
2. Группы симметрии и их обозначение. Приводимые и неприводимые представления. Характер матриц преобразования, свойства и их нахождение.

Билет 7

1. ИК-спектрометры с Фурье-преобразованием.
2. Колебания молекулы типа цис-дихлорэтилена.

Билет 8

1. Колебания кристаллических решеток на примере кристаллического полиэтилена.
2. Учет свойств симметрии. Координаты симметрии на примере молекулы воды.

Билет 9

1. Решение задачи о колебаниях молекулы воды в общем виде.
2. Формулировка правил отбора для ИК-спектроскопии в теории групп.

Билет 10

1. Теория динамического рассеяния света.
2. Инверсия дихроичного отношения в пленках поливинилхлорида.

Билет 11

1. Малоугловая рентгенография. Определение размера рассеивающих частиц»
2. Устройство релаксометра ЯМР.

Билет 12

1. Широкоугловая рентгенография. Определение степени кристалличности полимеров.
2. Методы измерения времен ядерной магнитной релаксации.

Контроль остаточных знаний: качественное знание всех экзаменационных вопросов.