

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ХІМІЇ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК**

ЗАТВЕРДЖЕНО
Вченою радою Інституту
хімії високомолекулярних
сполук НАН України
Протокол № 9
від «29» вересня 2022 року



Голова Вченої ради
Інституту хімії високомолекулярних
сполук НАН України
доктор хімічних наук
Олександр БРОВКО

ПРОГРАМА

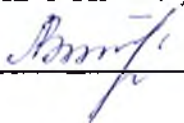
навчальної дисципліни

«МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ ПОЛІМЕРІВ»

ГАЛУЗЬ ЗНАНЬ	10 – ПРИРОДНИЧІ НАУКИ
СПЕЦІАЛЬНІСТЬ	102 – ХІМІЯ
СПЕЦІАЛІЗАЦІЯ	ХІМІЯ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК
РІВЕНЬ ОСВІТИ	ТРЕТІЙ (ОСВІТНЬО-НАУКОВИЙ)
ФОРМА НАВЧАННЯ	ДЕННА

РОЗРОБНИК ПРОГРАМИ:

Старший науковий співробітник відділу полімерних композитів ІХВС НАНУ, старший науковий співробітник, к.х.н Віра БУДЗІНСЬКА



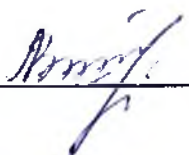
ПРОГРАМУ ЗАТВЕРДЖЕНО

На засіданні Вченої ради Інституту хімії високомолекулярних сполук НАН України

Протокол № 9

від «29» вересня 2022 року

Вчений секретар

 Віра БУДЗІНСЬКА

ВСТУП

Програму вибіркової навчальної дисципліни «**Методи дослідження полімерів**» складено відповідно до освітньо-професійної програми підготовки докторів філософії в галузі природничих наук за спеціальністю **102 - «Хімія»**.

Предметом вивчення навчальної дисципліни є сучасні методи дослідження полімерів та полімерних матеріалів, зокрема такі як: електронна спектроскопія (УФ- і видима, емісійна), коливальна спектроскопія (ІЧ, спектроскопія комбінаційного розсіювання світла), магнітно-резонансна спектроскопія (ЯМР), мас-спектроскопія, хроматографія. Невід'ємною частиною курсу є з'ясування будови, складу та формули речовин та сполук за допомогою фізичних методів дослідження.

Міждисциплінарні зв'язки: Навчальна дисципліна «**Методи дослідження полімерів**» згідно з навчальним планом належить до циклу дисциплін професійної підготовки, яка викладається на 2 курсі аспірантури. Курс відноситься до вибірових курсів спеціалізації «Хімія високомолекулярних сполук». Для вивчення курсу необхідні знання та вміння, набуті аспірантами з дисциплін «Хімія високомолекулярних сполук», «Фізика і хімія полімерів», «Фізико-хімічні методи дослідження полімерів».

Без знань методів дослідження полімерів досить важко з'ясувати склад, будову та формулу будь-якої речовини чи то сполуки. Активне вивчення як фізичних так і хімічних властивостей дає змогу більш глибоко пізнати явища природи, зокрема хімічні. Вирішуючи фізичні задачі виникають досить складні математичні проблеми, так як обробка експерименту, прямі та обернені методи потребують знань математичної теорії та розрахункових навиків. В зв'язку з такими складними проблемами фізичних методів існує спеціалізація вчених. Практично кожний метод є окремою спеціалізацією. Однак і фізик і хімік повинен мати уявлення про можливості кожного методу. Хімік повинен чітко ставити задачу, а фізик знайти метод її розв'язку та обчислення. Знання методів дослідження полімерів дає змогу поєднати в одній особі і фізика і хіміка, що правильно ставить задачу та вирішує її. Тому глибокі знання про методи дослідження полімерів дають змогу цілісного формування науковця.

Вивчення курсу «Методи дослідження полімерів» – необхідний етап підготовки висококваліфікованих спеціалістів хіміків. Матеріал курсу є основою для опанування курсів, пов'язаних з питаннями застосування методів дослідження для розв'язку наукових і прикладних хімічних проблем, створення в аспірантів багажу фактологічного матеріалу про взаємозв'язок будови полімерних сполук з їх властивостями, аналізу прикладних аспектів з застосуванням теоретичних основ для вирішення практичних задач. Застосування методів дослідження полімерів та вміння інтерпретувати одержані спектральні дані сприяє ефективному засвоєнню аспірантами як фундаментальних, так і спеціальних хімічних знань.

1. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

1.1. Мета навчальної дисципліни:

Метою курсу є опанування аспірантами поглиблених знань, основних понять і теоретичних засад про деякі сучасні інструментальні методи аналізу полімерів та полімерних матеріалів, знання яких дозволяє більш глибоко і обґрунтовано підходити до інтерпретації різноманітних результатів досліджень в хімії. В курсі методів дослідження аспірант повинен опанувати прийоми не просто механічного запам'ятовування тих чи інших властивостей полімерних матеріалів і сполук, а навчитись використовувати загальні закономірності, як-то прогнозувати який із доступних методів дослідження надасть повну картину про властивості тих чи інших класів полімерів, зокрема, це означає вміння прогнозувати практичні результати в залежності від будови полімеру. Важливим моментом є також навчити аспірантів самостійно опановувати матеріал, використовувати основну та додаткову літературу для індивідуальної роботи при підготовці до написання та захисту кваліфікаційної роботи.

1.2. Основні завдання навчальної дисципліни:

В результаті вивчення даного курсу аспірант повинен:

знати:

- закони, принципи та правила з хімії високомолекулярних сполук, органічної та фізичної хімії;

- сучасний стан методів досліджень будови полімерів, предмет, класифікацію методів і специфіку їх застосування;

- основні принципи роботи, що лежать в основі найбільш поширених фізичних методів, які використовують для дослідження полімерів, зокрема: електронної спектроскопії, ЯМР та ІЧ-спектроскопії, мас-спектрометрії, хроматографії та інших;

- функції основних складових елементів приладів, що використовуються в цих методах досліджень і техніку виконання методів;

- сфери застосування та можливості, які надають методи дослідження при вивченні будови полімерів, визначенні їх хімічного складу, та основних властивостей.

вміти:

- готувати зразки до проведення відповідних досліджень, ставити навчально-дослідні експерименти на основі оволодіння основними прийомами проведення досліджень полімерів та вимірювання експериментальних характеристик полімерних матеріалів, складати звіт по роботі та оформляти наукові статті, користуватись довідковими матеріалами;

- орієнтуватися в сучасних методах розрахунків, вміти користуватися пакетами програм; вміти встановлювати надійні кореляції розрахованих даних з результатами експериментальних досліджень;

- оцінювати взаємозв'язок між будовою та властивостями полімерних молекул, вміти прогнозувати властивості нових сполук за їх хімічною будовою;

- самостійно працювати з учбовою, довідковою та науковою хімічною літературою, проводити літературний пошук в області досліджень полімерів, робити узагальнюючі висновки;

- застосовувати одержані теоретичні знання та практичні навички в подальшій професійній діяльності.

мати навички:

- практичного застосування теоретичних знань для проведення досліджень полімерів та полімерних матеріалів із застосуванням різноманітних методів дослідження;

- планування і проведення експериментального процесу при вивченні полімерів і полімерних матеріалів із застосуванням найбільш поширених фізичних методів, які використовують для їх дослідження;

- кореляції отриманих експериментальних результатів із будовою полімерів і полімерних матеріалів та узагальнювати самостійно отримані в ході досліджень результати.

2. ВИМОГИ ДО РЕЗУЛЬТАТІВ ЗАСВОЄННЯ ДИСЦИПЛІНИ

В рамках даної дисципліни поглиблюються і розвиваються такі компетенції:

➤ **Універсальні компетенції:** здатність проектувати і здійснювати комплексні дослідження, в тому числі міждисциплінарні, на основі цілісного системного наукового світогляду з використанням знань в області історії і філософії науки;

➤ **Загальнопрофесійні компетенції:** здатність до проведення самостійних наукових досліджень; набуття компетентностей щодо ініціювання та виконання наукових досліджень, які дають можливість переосмислити наявні та отримати нові знання; здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел; здатність самостійно здійснювати науково-дослідницьку діяльність в хімії високомолекулярних сполук з використанням сучасних методів дослідження та інформаційно-комунікаційних технологій.

➤ **Професійні компетенції:** здатність організовувати проведення експериментів і випробувань, проводити їх обробку, аналізувати результати експериментальних досліджень, робити висновки та узагальнювати отримані дані у вигляді наукових публікацій для провідних профільних журналів.

3. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 240 годин/8 кредитів ECTS.

Модулі дисципліни і види занять.

Ч.ч.	Модулі дисципліни	Кількість кредитів ЕКТС	Обсяг навчальної роботи (в годинах)						Вид підсумкового контролю
			загальний обсяг	всього аудиторних	лекції	семінари	практичні	самостійна робота	
1	Електронна спектроскопія	1	30	8	4	2	2	22	
2	Коливальна спектроскопія	4	120	14	8	2	4	106	
3	Спектроскопія ядерного магнітного резонансу	2	60	6	4	-	2	54	
4	Мас-спектрометрія та хроматографія	1	30	10	6	2	2	20	
Разом		8	240	38	22	6	10	202	екзамен

Навчальна дисципліна містить чотири кредитні модулі:

МОДУЛЬ 1. ПРЕДМЕТ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ ПОЛІМЕРІВ. ЕЛЕКТРОННА СПЕКТРОСКОПІЯ.

Тема 1. Вступ. Предмет і мета навчального курсу. Значення методів дослідження полімерів для прогнозування їхніх характеристик. Класифікація та коротка характеристика основних методів які використовуються для дослідження полімерів та полімерних матеріалів.

Тема 2. Електронна спектроскопія. Походження електронних спектрів. Достатні умови спостереження електронних спектрів і способи зображення електронних спектрів. Структура органічних молекул та електронні спектри. Хромофори та ауксохроми. Основні типи хромофорів, що мають полімери. Форма смуг поглинання, батохромне та гіпсохромне зміщення смуг поглинання, інтенсивність поглинання. Поглинання полімерами видимої частини спектра. Принципи спектрофотометричного аналізу полімерів.

МОДУЛЬ 2. КОЛИВАЛЬНА СПЕКТРОСКОПІЯ. ІНФРАЧЕРВОНА СПЕКТРОСКОПІЯ. СПЕКТРИ КОМБІНАЦІЙНОГО РОЗСІЮВАННЯ.

Тема 3. Інфрачервоні спектри. Природа коливальних спектрів. Поняття про валентні та деформаційні коливання. Теорія коливальних спектрів: коливання гармонічного осцилятора; фундаментальні переходи в коливальних спектрах хімічних сполук; нормальні коливання; силова стала, співвідношення між силовою сталою, довжиною та кратністю зв'язку; ймовірність переходів в ІЧ спектрах та інтенсивність смуг в ІЧ-спектрах; характеристичність коливань молекул за частотою, формою та інтенсивністю.

Тема 3. Інфрачервоні спектри. Метод порушеного повного внутрішнього відбиття та багаторазового порушеного повного внутрішнього відбиття. Фур'є-спектроскопія. Вибір оптимальних умов реєстрації ІЧ спектрів. Найбільш поширені недоліки інфрачервоних спектрограм.

Тема 3. Інфрачервоні спектри. Найважливіші характеристичні смуги поглинання в області основних частот коливань полімерів. Залежність коливальних спектрів від хімічної будови молекул полімерів, проведення структурного аналізу за ІЧ спектрами.

Тема 4. Спектри комбінаційного розсіювання. Релеєвське розсіювання світла. Комбінаційне розсіювання. Спектр Рамана. Теорія поляризованості молекул. Інтенсивність розсіювання у КР. Порядок виконання структурного аналізу полімерів на основі спектрів комбінаційного розсіювання.

МОДУЛЬ 3. СПЕКТРОСКОПІЯ ЯДЕРНОГО МАГНІТНОГО РЕЗОНАНСУ.

Тема 5. Спектри протонного магнітного резонансу. Хімічний зсув для протонів у різних сполуках та його вимірювання. Константи спин-спінової взаємодії. Розщеплення ліній в спектрах ЯМР. Трикутник Паскаля. Опис поведінки ядер речовини в магнітному полі. Класифікація спектрів ПМР. Залежність спектрів ПМР від умов реєстрації. Загальні рекомендації з аналізу спектрів ПМР під час структурного аналізу. Місце ядерного магнітного резонансу в дослідженні полімерів. Спектри ПМР та будова молекул полімерів.

Тема 5. Спектри ядерного магнітного резонансу ^{13}C , ^{31}P , ^{29}Si , ^{19}F та інших.

Умови реєстрації спектрів ЯМР ^{13}C , ^{31}P , ^{29}Si , ^{19}F та інших. Рекомендації з розшифровки спектрів ЯМР ^{13}C , ^{31}P , ^{29}Si , ^{19}F та інших.

МОДУЛЬ 4. МАС-СПЕКТРОМЕТРІЯ. ХРОМАТОГРАФІЯ.

Тема 6. Мас-спектрометрія. Принцип утворення мас-спектрів. Загальна характеристика приладів, які використовуються для реєстрації мас-спектрів. Вибір оптимальних умов запису мас-спектрів. Загальні закономірності фрагментації органічних молекул під час електронного удару. Інтерпретація мас-спектрів під час структурного аналізу. Метод метод матрично-активованої лазерної десорбція/іонізація (MALDI) для дослідження полімерів.

Тема 7. Хроматографія. Класифікація методів хроматографії для ідентифікації полімерів. Теоретичні основи хроматографічних методів. Тонкошарова хроматографія. Хроматографія на папері. Гель-проникна (молекулярно-ситова) хроматографія. Практичні аспекти інтерпретації отриманих даних.

Тема 8. Комплексне застосування методів дослідження для полімерів. Галузі застосування різних методів з метою визначення молекулярної структури полімерів та полімерних матеріалів. Довідники, атласи спектрів. Використання модельних сполук. Кодування структурної інформації. Банки даних, їх значення при машинній обробці спектрів. Планування експерименту. Порівняльна характеристика методів для дослідження полімерів та полімерних матеріалів.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

Основна:

1. Robert M. Silverstein, Francis X. Webster, David Kiemle // Spectrometric Identification of Organic Compounds, 7th Edition, Wiley, 2005, 512 p.
2. Robert M. Silverstein, Francis X. Webster, David J. Kiemle, David L. Bryce Spectrometric Identification of Organic Compounds, 8th Edition, John Wiley & Sons, 2014, 464 p.
3. The Royal Society of Chemistry // Ultraviolet/visible spectroscopy, Unilever, 2011.
4. Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy, Second Edition / Brian C. Smith .- Taylor & Francis, 2011.- 207 p.

5. Spectrometric identification of organic compounds // RM Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle, D.L. Bryce. – 2014.

6. Ferraro J.R. / Practical Fourier transform infrared spectroscopy: industrial and laboratory chemical analysis. - 2012 - books.google.com/

7. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу / Ю.М. Воловенко, І.В. Комаров, О.В. Туров, В.П. Хиля. – Київ: РВЦ "Київський університет", 2016. – 703 с.

8. Keeler James. Understanding NMR spectroscopy. John Wiley & Sons, 2011.

9. Claridge Timothy DW. High-resolution NMR techniques in organic chemistry. Vol. 27. Elsevier, 2016.

10. Affinity Chromatography Handbook

https://research.fhcrc.org/content/dam/stripe/hahn/methods/biochem/Affinity_Chromatography_Handbook-Specific_Groups_of_Biomolecules.pdf

Додаткова:

1. Valeur B. Molecular fluorescence. Willey-VCH. E-Book – 2001. – 500 p.

2. Мельничук Д.О. Аналітичні методи досліджень. Спектроскопічні методи аналізу: теоретичні основи і методики: навчальний посібник для підготовки студентів вищих навчальних закладів / Д.О. Мельничук, С.Д. Мельничук, В.М. Войціцький та ін.: за ред. акад. Д.О. Мельничука. – К.: ЦП «Компринт», 2016. – 289 с.

3. Збірка задач для практичних занять з розділу "Інфрачервона спектроскопія" дисципліни "Фізичні методи дослідження в хімії" / Д.С. Мілохов, О.В. Шабликіна. – К.: 2021. – 126 с.

4. Gross J. Mass Spectrometry: A Textbook. 2nd Ed. Springer, 2011. -779 p.

5. Pash H., Schrepp W., MALDI-TOF Mass Spectrometry of Synthetic Polymers. Springer, 2003, ISBN 3-540-44259-6.

4. ФОРМА ПІДСУМКОВОГО КОНТРОЛЮ УСПІШНОСТІ НАВЧАННЯ:

Екзамен.

5. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ УСПІШНОСТІ НАВЧАННЯ:

Діагностика успішності навчання аспірантів під час проведення

лекційних занять:

- відповіді на питання за лекційним курсом;
- усні завдання.

Діагностика успішності навчання аспірантів під час проведення

семінарів та індивідуальних занять:

- усне опитування;
- участь в обговоренні дискусійних питань.