

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ



УТВЕРЖДАЮ:

профессор по научно-методической
и учебной работе

_____ Е.И. Скафа

_____ » апреля 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ»

Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Магистерская программа:	химия
Образовательная программа:	академическая магистратура
Квалификация:	магистр
Форма обучения:	<u>очная</u> , очно-заочная, заочная

Донецк 2020

УТВЕРЖДАЮ:

Декан химического факультета

А.В. Белый

«16» апреля 2020 г.



Программа составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) направления подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 655 от 13 июля 2017 г.;

Порядка организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 1171 от «10» ноября 2017 г.;

учебного плана и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.04.01 Химия, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Доцент кафедры физической химии,
к.х.н., доцент

Н.А. Туровский

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии

Протокол № 13 от «28» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой

В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 3 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической
комиссии факультета

Н.В. Яблочкова

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Дисциплина «Актуальные проблемы физической химии» относится к вариативной части (Б1.В.ОД.10) учебного плана по направлению подготовки 04.04.01 Химия (магистерская программа Химия). Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической химии. Дисциплина, опираясь на химическую (неорганическая, аналитическая, органическая, физическая, квантовая химия), философскую, психолого-педагогическую подготовки (психология, педагогика) студентов, закладывает фундамент научно-методической подготовки будущих исследователей в области теории и методики научных исследований и преподавания химических дисциплин. Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее во время учебной (ознакомительной) практики, производственной практики (научно-исследовательская работа), производственной практики (преддипломная практика), при написании магистерской диссертации.

2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

<i>Характеристика учебной дисциплины</i>		
Направление подготовки	04.04.01 Химия	
Магистерская программа	Химия	
Образовательная программа	академическая магистратура	
Квалификация	магистр	
Количество содержательных модулей	1	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	вариативная часть	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	1 модульный контроль, 1 экзамен	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	2	
Год подготовки	2	
Семестр	3	
Количество часов	72	
- лекционных	-	
- практических, семинарских	24	
- лабораторных	-	
- самостоятельной работы	48	
в т.ч. индивидуальное задание		
Недельное количество часов,	6	
в т.ч. аудиторных	2	

Б1.В.ОД.10	Актуальные проблемы физической химии		3		3	2	72	24		24		48
------------	--------------------------------------	--	---	--	---	---	----	----	--	----	--	----

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели и задачи

Цель изучения дисциплины «Актуальные проблемы физической химии»- формирование у студентов систематических знаний современного состояния, возможностей и ограничений

технологий компьютерного синтеза, распознавание структуры химических соединений, структурной химии, молекулярного моделирования, QSAR и молекулярного докинга молекулярных систем.

Задачи дисциплины:

- Привитие магистрам знаний основ методологии, методов и понятий научного исследования.
- Формирование практических навыков и умений применения научных методов, а также разработки программы методики проведения научного исследования.
- Исследование эмпирических и теоретических методов научных исследований, которые можно использовать в магистерской диссертации.
- Воспитание нравственных качеств, привитие этических норм в процессе осуществления научного исследования.
- подготовить специалиста-химика, который, опираясь на основные концепции атомно-молекулярной архитектуры и электронной структуры молекулярного уровня организации вещества, будет использовать методы компьютерной химии, как средство получения химической информации о строении и свойствах химических соединений.
- Сформировать базовые представления о теоретических методах, которыми изучают электронное строение атомов и молекул; для получения информации о строении и реакционной способности молекул научить студентов использовать методы квантовой химии, квантовохимическую терминологию; рассмотреть современные комплексы программ для проведения квантово-химических расчетов.

Требования к результатам освоения дисциплины: Процесс изучения дисциплины «Актуальные проблемы физической химии» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО РФ направления подготовки 04.04.01 Химия и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.04.01 Химия (магистерская программа: химия):

универсальные компетенции:

- способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий (УК-1);
- способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла (УК-2);
- способность организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели (УК-3);
- способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранных языках, для академического и профессионального взаимодействия (УК-4);
- способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия (УК-5);
- способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки (УК-6).

общепрофессиональные компетенции:

- способность выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1);
- способность анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук (ОПК-2);
- способность использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3);
- способность готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов (ОПК-4).

профессиональные компетенции, соответствующие виду (видам) профессиональной деятельности, на которые ориентирована программа магистратуры:

научно-исследовательская деятельность:

- способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1);
- владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);
- готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3);
- способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-4);

организационно-управленческая деятельность:

- владением навыками составления планов, программ, проектов и других директивных документов (ПК-5);
- способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности (ПК-6);

научно-педагогическая деятельность:

- владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-7).

В результате изучения учебной дисциплины студент должен:**знать:**

- методологию молекулярного моделирования;
- QSAR/QSPR методологию в компьютерном дизайне биологически/реакционно активных веществ;
- методологию установления структуры химических соединений спектральными методами;
- методологию физико-химических основ компьютерного синтеза;
- методологию установления структуры химических соединений спектральными методами;
- методологию выбора уровня теории молекулярного моделирования методами квантовой химии;
- методологию выбора уровня теории молекулярного моделирования методами квантовой химии;
- концептуальные основы нанохимии - прямого пути к высоким технологиям нового века;
- концептуальные основы наноносителей лекарственных веществ.
- основные понятия атомно-молекулярной архитектуры химических соединений.
- концептуальные основы структурной химии;
- закономерностей связи электронного строения химических соединений с их свойствами и реакционной способностью.

уметь:

- получать структурно-химическую информацию – молекулярные дескрипторы исследуемых объектов используя комплексы программ структурной химии: HyperChem, MO-PAC, GAUSSIAN 09, GAMESS;
- определить равновесную структуру;
- провести конформационный анализ;
- рассчитать энергию ионизации в вертикальном и адиабатическом приближении, а также по теореме Купманса;
- рассчитать энергию диссоциации химических соединений на ионы или радикалы;

- рассчитать дипольные моменты и использовать их для обоснования результатов конформационного анализа;
- анализировать полученные результаты, опираясь на знания концепций структурной химии;
- использовать программы структурной химии для решения химических задач;
- осуществить поиск необходимых физико-химических данных в электронных источниках научной химической информации;
- применять свои знания на практике и владеть навыками работы на современных компьютерных системах;
- творчески подходить к решению задачи;
- проводить поиск структурной информации в современных электронных ресурсах;
- провести и обосновать выбор метода структурной химии, который необходим для решения поставленной задачи;
- *ориентироваться* в круге основных проблем современных актуальных направлений физической химии.

владеть:

- навыками применения основных методологий актуальных направлений физической химии для анализа свойств химических соединений.
- современными методами научного исследования в предметной сфере;
- навыками управления научным коллективом;
- навыками совершенствования и развития своего научного потенциала.

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Порядковый номер и наименование темы	Краткое содержание темы
<i>Содержательный модуль 1.</i>	
<i>Тема 1.</i> Методология научного исследования в физической химии.	Логика и структура научного исследования в физической химии. Роль Аристотеля в разработке научного метода. Научный метод в химии. Этапы физико-химического исследования. Актуальные проблемы физико-химических исследований.
<i>Тема 2.</i> Основные направления исследований в нанохимии	Нанометровый мир. Основные направления исследований в нанохимии. Основные нанообъекты: наночастица, нанокластер, наноматериал, наномотор, нанопоры, наносистема, нанотрубка, фуллерен, графен. Квантовые нанообъекты: квантовая точка, квантовая проволока, квантовая стенка (яма). Нанотехнологии. Концепции изготовления нанообъектов: автосборка, самосборка, литографически индуцированная самосборка, сборка «сверху-вниз», сборка «снизу-вверх», золь-гель технология. Наномеханизмы: молекулярная машина, ассемблер, ограниченный ассемблер, дезассемблер, ионная помпа. Ожидаемые от нанохимии результаты. Нанотехнологии в медицине и фармации. Нанотехнологии в фармацевтике. Нанотехнологии в медицине. <u>Органическая косметика с наночастицами.</u>
<i>Тема 3</i> Концепция супрамолекулярного	Супрамолекулярные реакции. Супрамолекулярные каталитические реакции. Химическая активация реактан-

механизма химических реакций	<p>тов супрамолекулярных реакций. Источник энергии для химической активации субстрата. Основные этапы химической активации реагентов супрамолекулярных реакций. Постулат Генри о механизме ферментативных реакций. Постулат Альфреда Вернера о механизме ферментативных реакций. Постулат Эмиля Фишера о механизме ферментативных реакций. Постулат Пауля Эрлиха о механизме ферментативных реакций. Постулат Дениела Кошланда о механизме ферментативных реакций. Кинетическая стабильность интермедиатов супрамолекулярных реакций. Термодинамическая стабильность интермедиатов супрамолекулярных реакций. $s...s$-Орбитальная комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия. $\sigma-p...p$- Орбитальная комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия. $\pi-p...p$- Орбитальная комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия. $s...p$- Орбитальная комплементарность молекулярной информации реагентов на уровне их взаимодействия. Стереохимическая комплементарность молекулярной информации реагентов. Динамическая комплементарность молекулярной информации реагентов. Принцип двойной комплементарности молекулярной информации реагентов. Молекулярный докинг реагентов. Хелатный эффект в процессе молекулярного распознавания реагентов. Макроциклический эффект в процессе молекулярного распознавания реагентов. Темплатный эффект реагентов супрамолекулярных реакций. Кинетический темплатный эффект. Термодинамический темплатный эффект. Кинетическая селективность супрамолекулярных реакций. Термодинамическая селективность супрамолекулярных реакций. Супрамолекулярные самопроцессы. Самосборка интермедиатов супрамолекулярных реагентов. Самоорганизация интермедиатов супрамолекулярных реагентов.</p>
<p>Тема 4. Структура и ППЭ химических соединений на молекулярном и супрамолекулярном уровнях организации вещества</p>	<p>Методология установления равновесной структуры химических частиц. Концепция молекулярной структуры в химии. Топологическая модель молекулярной структуры. Геометрическая модель молекулярной структуры. Дискретная модель молекулярной структуры. Континуальная модель молекулярной структуры. Статическая модель молекулярной структуры. Динамическая модель молекулярной структуры. L,T,I - модель молекулярной структуры химической частицы. L,T,I - модель молекулярной структуры вещества. Поверхность потенциальной энергии химических соединений: стационарные точки ППЭ. Конформации и конформеры химических частиц вещества. Методология конформационного анализа химических соединений. Число конформеров в конформационной смеси. Барьеры</p>

	внутреннего вращения. Анализ состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии. Анализ состава смеси конформеров методом спектроскопической химии.
Тема 5. Компьютерная спектроскопическая химия	Методология установления структуры молекул методами спектроскопии. Спектроскопия и спектроскопическая информация. Необходимое и достаточное условие появления полосы в инфракрасном спектре химических частиц. Спектроскопические эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с электромагнитным излучением. Влияние радиоволнового электромагнитного излучения на структуру химических частиц. Влияние микроволнового электромагнитного излучения на структуру химических частиц. Влияние инфракрасного электромагнитного излучения на структуру химических частиц. Влияние ультрафиолетового электромагнитного излучения на структуру химических частиц. Влияние рентгеновского электромагнитного излучения на структуру химических. Методология установления структуры молекул при использовании спектроскопических информационно-поисковых систем. Методология установления структуры молекул при использовании спектроскопических экспертных систем. Методология установления структуры молекул при использовании спектроскопического безэталонного анализа.
Тема 6. Фемтохимия и динамика химических реакций	Время в физической химии: кинетика и динамика. Методы химической кинетики и динамики: метод непрерывной струи; метод ускоренной струи; метод остановленной струи. Теоретические основы фемтохимии. Принципы, по которым проводятся экспериментальные исследования фемтохимии.

Тематический план

Содержательный модуль 1						
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов					
	Очная форма обучения					
	всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 1. Методология научного исследования в физической химии.	12		4		8	
Тема 2. Основные направления исследований в нанохимии	12		4		8	

Тема 3 Концепция супрамолекулярного механизма химических реакций	12		4		8	
Тема 4. Структура и ППЭ химических соединений на молекулярном и супрамолекулярном уровнях организации вещества	12		4		8	
Тема 5. Компьютерная спектроскопическая химия	12		4		8	
Тема 6. Фемтохимия и динамика химических реакций	12		4		8	
Итого <i>по содержательному модулю 1</i>	72		24		48	

4. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Лекции и лабораторные занятия не предусмотрены учебным планом.

ТЕМЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название темы	Количество часов
1.	Методология научного исследования в физической химии.	4
2.	Основные направления исследований в нанохимии	4
3.	Концепция супрамолекулярного механизма химических реакций	4
4.	Структура и ППЭ химических соединений на молекулярном и супрамолекулярном уровнях организации вещества	4
5.	Компьютерная спектроскопическая химия	4
6.	Фемтохимия и динамика химических реакций	4
	ВСЕГО	24

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

№ п/п	Название темы	Количество часов
1.	Методология научного исследования в физической химии.	4
	Индивидуальная работа (п. 1).	4
2.	Основные направления исследований в нанохимии	4

	Индивидуальная работа (п. 2).	4
3.	Концепция супрамолекулярного механизма химических реакций	4
	Индивидуальная работа (п. 3).	4
4.	Структура и ППЭ химических соединений на молекулярном и супрамолекулярном уровнях организации вещества	4
	Индивидуальная работа (п. 4).	4
5.	Компьютерная спектроскопическая химия	4
	Индивидуальная работа (п. 5).	4
6.	Фемтохимия и динамика химических реакций	8
	ВСЕГО	48

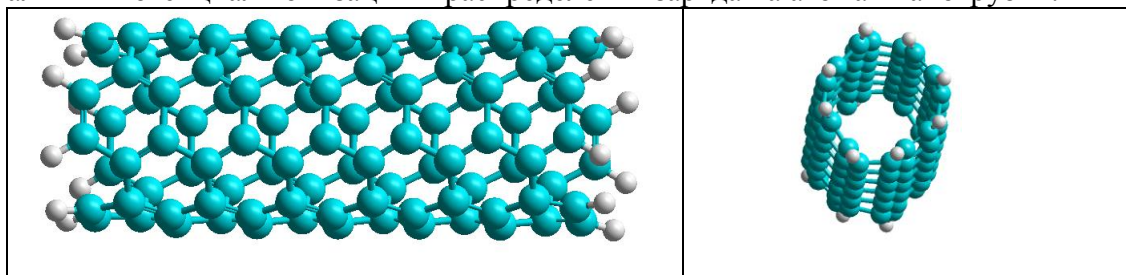
7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

Индивидуальная работа

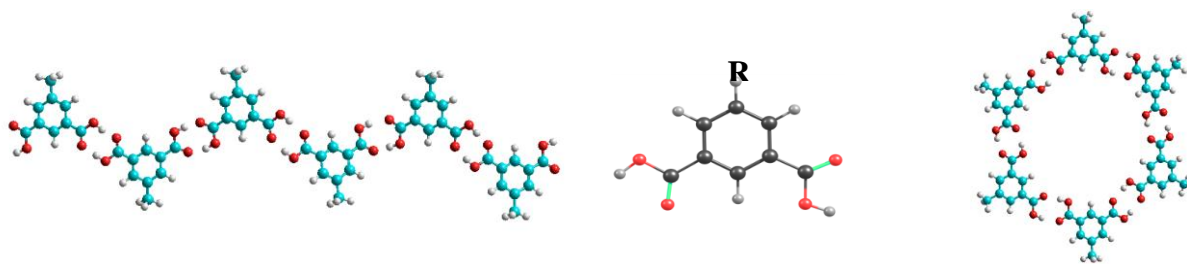
Цель: овладеть теорией и практикой актуальных проблем физической химии.

1. Сформулировать тему магистерской работы. Обосновать актуальность темы исследования. Выявить основные противоречия, порождающие исследование. Сформулировать проблему исследования путем выделения научной составляющей противоречия. Определить объект, предмет физико-химического исследования. Сформулировать физико-химического исследования. Построить гипотезу исследования и предоставить ее теоретическое обоснование. Определить задачи исследования. Выбрать методы исследования. Спроектировать опытно-экспериментальную работу. Составить план литературного оформления исследования (содержание магистерской работы).

2. Выполнить квантово-химическое моделирование нанотрубки. Провести квантово-химический расчет в приближении полуэмпирической квантовой химии (PM7)/ Определить величину дипольного момента, ориентационную поляризуемость при 298.15 К. Определить орбитальный потенциал ионизации и распределения заряда на атомах нанотрубки.



3. Построить супрамолекулярные наночастицы янус-молекул – изомеров Р-фталевой кислоты. Провести квантово-химический расчет полученных супрамолекулярных наночастиц и соответствующих конформеров Р-фталевой кислоты одним из методов полуэмпирической квантовой химии в режиме оптимизации молекулярной геометрии при 298.15 К. Определить для каждого объекта работы: энергию при 0 К и при 298.15 К, стандартную энтальпию образования, энтропию при 298.15 К, свободную энергию Гиббса при 298.15 К.



4. Получить равновесные конфигурации *para*-R-каликс[4]арена, которые соответствуют конформерам I - IV, в приближении методов полуэмпирической квантовой химии. Выполнить расчет энтальпии образования и свободной энергии Гиббса образования в приближении метода AM1 для I – IV конформеров *para*-R-каликс[4]арена при 298 К. Определить наиболее стабильный конформер *para*-R-каликс[4]арена. Определить параметры конформационного равновесия *para*-R-каликс[4]арена.

I	II	III	IV

5. С целью установления зависимости экспериментальных и рассчитанных частот валентного колебания карбонильной группы пероксиэфиров провести поиск литературных источников и обобщить литературные данные по теме “Колебательная спектроскопия органических пероксиэфиров карбоновых кислот (5-10 объектов). Определить равновесную молекулярную структуру исследуемого ряда трет-бутилпероксиэфиров карбоновых кислот. Провести конформационный анализ исследуемых объектов. В приближении изолированной химической частицы PM6 методом полуэмпирической квантовой химии рассчитать ИК- спектры равновесных конфигураций исследуемых пероксидов. (Использовать PM6 и PDDG методы полуэмпирической квантовой химии). Рассчитать ИК-спектры этих объектов в приближении рсм модели учета растворителя. Выполнить отнесение частот нормальных колебаний; Установить зависимость между рассчитанными и экспериментальными частотами нормальных колебаний трет-бутилпероксиэфиров карбоновых кислот.

8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ.

1. Логика и структура научного исследования в физической химии.
2. Этапы физико-химического исследования.
3. Фундаментальные химические, физические и механические особенности наносостояния.
4. Перспективы и проблемы нанотоксикологии
5. Этические проблемы наномедицины.
6. Супрамолекулярные каталитические реакции
7. Химическая активация реагентов супрамолекулярных реакций
8. Постулат Дениела Кошланда о механизме ферментативных реакций
9. Континуальная модель молекулярной структуры
10. Методология установления структуры молекул при использовании спектроструктурных экспертных систем.
11. Методы химической кинетики и динамики: метод непрерывной струи; метод ускоренной струи; метод остановленной струи.
12. Теоретические основы фемтохимии.

9. ОБРАЗЕЦ ВАРИАНТА МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ И КРИТЕРИЙ ОЦЕНИВАНИЯ

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» Химический факультет

Направление подготовки: **04.04.01 Химия**
 Магистерская программа: **химия**
 Программа подготовки: **академическая магистратура**
 Семестр: **1**
 Учебная дисциплина: **Актуальные проблемы физической химии**

МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА ВАРИАНТ №1

1. Этапы физико-химического исследования.
2. Фундаментальные химические, физические и механические особенности наносостояния.
3. Перспективы и проблемы нанофармакологии

Утверждено на заседании кафедры физической химии, протокол № ____ от « ____ » _____ 20 ____ г.

Зав. кафедрой _____
 Преподаватель _____

Критерии оценивания модульного контроля

Номер задания	Количество баллов
Задание 1	10
Задание 2	10
Задание 3	10
Всего	30

9. ОБРАЗЕЦ ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА

(теоретические вопросы к экзамену, образец билета и критерии оценивания)

Теоретические вопросы к экзамену

1. Логика и структура научного исследования в физической химии.
2. Этапы физико-химического исследования.
3. Актуальные направления физико-химических исследований.
4. Классификация наноматериалов по критерию их размерности.
5. Фундаментальные химические, физические и механические особенности наносостояния.
6. Исследование взаимодействий в ансамблях нанообъектов.
7. Новые подходы в технологии наноматериалов.
8. Создание новых типов наноматериалов.
9. Моделирование наноматериалов и процессов их формирования.
10. Разработка методов анализа наносистем и наноматериалов.
11. Полимерные наноносители лекарственных веществ: наносферы и нанокapsулы

12. Полимерные наноносители лекарственных веществ: дендримеры.
13. Влияние молекулярной массы полимерных наноносителей на их поведение в организме
14. Влияние молекулярно-массового распределения полимерных наноносителей на их поведение в организме.
15. Влияние строения боковой цепи полимерных наноносителей на их поведение в организме.
16. Биосовместимость полимерных наноносителей.
17. Биodeградируемость полимерных наноносителей.
18. Способы получения полимерных наноносителей: методика прямого растворения, диализ, эмульсионная методика.
19. Перспективы и проблемы нанофармакологии
20. Использование наноматериалов в фармакологии.
21. Основные функции наноносителей для доставки лекарственных средств.
- 22. Нанотерапия.**
23. Нанориски, сдерживающие развитие и внедрение нанолечарств в медицинскую практику.
24. О безопасности нанотехнологий в здравоохранении.
25. Этические проблемы наномедицины.
26. Ожидаемые риски нанолекарств.
27. Супрамолекулярные реакции
28. Супрамолекулярные каталитические реакции
29. Химическая активация реагентов супрамолекулярных реакций
30. Источник энергии для химической активации субстрата
31. Основные этапы химической активации реагентов супрамолекулярных реакций
32. Постулат Генри о механизме ферментативных реакций
33. Постулат Альфреда Вернера о механизме ферментативных реакций
34. Постулат Эмиля Фишера о механизме ферментативных реакций
35. Постулат Пауля Эрлиха о механизме ферментативных реакций
36. Постулат Дениела Кошланда о механизме ферментативных реакций
37. Стереохимическая комплементарность молекулярной информации реагентов.
38. Динамическая комплементарность молекулярной информации реагентов.
39. Принцип двойной комплементарности молекулярной информации реагентов.
40. Молекулярный докинг реагентов.
41. Хелатный эффект в процессе молекулярного распознавания реагентов.
42. Макроциклический эффект в процессе молекулярного распознавания реагентов.
43. Темплатный эффект реагентов супрамолекулярных реакций.
44. Кинетический темплатный эффект.
45. Термодинамический темплатный эффект.
46. Кинетическая селективность супрамолекулярных реакций.
47. Термодинамическая селективность супрамолекулярных реакций.
48. Супрамолекулярные самопроцессы.
49. Самосборка интермедиатов супрамолекулярных реагентов.
50. Самоорганизация интермедиатов супрамолекулярных реагентов.
51. Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.
52. Концепция молекулярной структуры в химии.
53. Топологическая модель молекулярной структуры.
54. Геометрическая модель молекулярной структуры.
55. Дискретная модель молекулярной структуры
56. Континуальная модель молекулярной структуры
57. Статическая модель молекулярной структуры
58. Динамическая модель молекулярной структуры
59. L,T,I - модель молекулярной структуры химической частицы
60. L,T,I - модель молекулярной структуры вещества
61. Поверхность потенциальной энергии.

62. Конформации и конформеры химических частиц вещества.
63. Методология конформационного анализа химических соединений.
64. Число конформеров в конформационной смеси.
65. Барьеры внутреннего вращения.
66. Анализ состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии.
67. Анализ состава смеси конформеров методом методами спектроскопической химии.
68. Конформационная номенклатура.
69. Базовые понятия методологии определения молекулярной структуры вещества методом рентгеноструктурного анализа.
70. r - модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
71. r' – модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
72. r, U – модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
73. $r, \delta r$ - модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
74. Базовые понятия методологии определения молекулярной структуры вещества методом электронографии.
75. Базовые понятия методологии определения молекулярной структуры вещества методом нейтронографии.
76. Операционные эффекты дифракционных методов определения молекулярной структуры.
77. Эффекты влияния агрегатного состояния вещества на молекулярную структуру химических частиц.
78. Методология установления структуры молекул методами спектроскопии.
79. Спектроскопия и спектроскопическая информация.
80. Необходимое и достаточное условие появления полосы в инфракрасном спектре химических частиц.
81. Спектроскопические эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с электромагнитным излучением.
82. Эффект влияния радиоволнового электромагнитного излучения на структуру химических частиц.
83. Эффект влияния микроволнового электромагнитного излучения на структуру химических частиц
84. Эффект влияния инфракрасного электромагнитного излучения на структуру химических частиц
85. Эффект влияния ультрафиолетового электромагнитного излучения на структуру химических частиц.
86. Эффект влияния рентгеновского электромагнитного излучения на структуру химических
87. Методология установления структуры молекул при использовании спектроскопических информационно-поисковых систем.
88. Методология установления структуры молекул при использовании спектроскопических экспертных систем.
89. Методология установления структуры молекул при использовании спектроскопического безэталонного анализа.
90. Время в физической химии: кинетика и динамика.
91. Методы химической кинетики и динамики: метод непрерывной струи; метод ускоренной струи; метод остановленной струи.
92. Теоретические основы фемтохимии.
93. Принципы, по которым проводятся экспериментальные исследования фемтохимии.

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

Направление подготовки:

04.04.01 Химия

Магистерская программа:

химия

Программа подготовки

академическая магистратура

Семестр

1

Учебная дисциплина

Актуальные проблемы физической химии**БИЛЕТ №1**

1. Способы получения полимерных наноносителей: методика прямого растворения, диализ, эмульсионная методика.
2. Перспективы и проблемы нанофармакологии
3. Использование наноматериалов в фармакологии.
4. Основные функции наноносителей для доставки лекарственных средств.
5. Нанориски, сдерживающие развитие и внедрение нанолечарств в медицинскую практику.

Утверждено на заседании кафедры физической химии.

Протокол № ____ от «__» _____ 20__ года

Заведующий кафедрой _____

Экзаменатор _____


Критерии оценивания экзамена

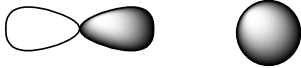
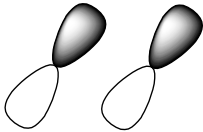
Номер задания	Количество баллов
Задание 1	25
Задание 2	М
Задание 3	М
Задание 4	М
Задание 5	М
Всего	100

11. ОБРАЗЕЦ ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ

В приведенных тестах укажите правильный ответ (правильных вариантов ответа один или несколько).

1.	<p>Граничная поверхность, которая разделяет связывающую и атисвязывающую области, определяется условием:</p> <ol style="list-style-type: none"> а. $f_2 = f_1 + f_3$; б. $f_2 = f_3$; в. $f_1 + f_2 + f_3 = 0$. 	
2.	Проанализировать структуру МО (ψ_1)	

	$\psi_1 = \dots + c_{11}\varphi_{S(A)} + c_{12}\varphi_{S(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада в образование химической связи s – АО, которые центрированы на атомах А и В.</p> <p>а. связывающий вклад; б. анти связывающий вклад. в. несвязывающий вклад.</p>	
3.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_2)</p> $\Psi_2 = \dots - c_{21}\varphi_{P_x(A)} + c_{22}\varphi_{P_x(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада в образование σ-химической связи р – АО, которые центрированы на атомах А и В.</p> <p>а. связывающий вклад; б. анти связывающий вклад; в. несвязывающий вклад.</p>	
4.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_2)</p> $\Psi_2 = \dots - c_{21}\varphi_{P_x(A)} + c_{22}\varphi_{P_x(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада р – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование π-химической связи.</p> <p>а. связывающий вклад; б. анти связывающий вклад; в. Несвязывающий вклад.</p>	
5.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_1)</p> $\psi_1 = \dots + c_{11}\varphi_{S(A)} + c_{12}\varphi_{P_x(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада s и р – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование химической связи.</p> <p>а. связывающий вклад; б. анти связывающий вклад; в. несвязывающий вклад.</p>	
6.	<p>S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию.</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{S(A)}$ и $c_{22}\varphi_{S(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{S(A)} \dots c_{22}\varphi_{S(B)} +$ <p>а. связывающую; б. анти связывающую; в. несвязывающую. г. - $c_{21}\varphi_{S(A)}$; д. + $c_{21}\varphi_{S(A)}$; е. - $c_{22}\varphi_{S(B)}$; ж. + $c_{22}\varphi_{S(B)}$.</p>	
7.	<p>p_x и S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>	

	 <p>Выбрать компоненты $c_{21}\phi_{Px(A)}$ и $c_{22}\phi_{Px(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\phi_{Px(A)} \dots c_{22}\phi_{Px(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\phi_{Px(A)}$; д. $+c_{21}\phi_{Px(A)}$; е. $-c_{22}\phi_{Px(B)}$; ж. $+c_{22}\phi_{Px(B)}$.</p>	
8.	<p>P_z АО центрированы на атомах А и В и образуют ... π-комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\phi_{Pz(A)}$ и $c_{22}\phi_{Pz(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\phi_{Pz(A)} \dots c_{22}\phi_{Pz(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\phi_{Pz(A)}$; д. $+c_{21}\phi_{Pz(A)}$; е. $-c_{22}\phi_{Pz(B)}$; ж. $+c_{22}\phi_{Pz(B)}$.</p>	
9.	<p>Энергия резонансного орбитального взаимодействия атомов А и В вычисляется по выражению:</p> <p>а. $E_{AB}^k = -\frac{1}{2} \gamma_{AB} \sum_{i=1}^{AO} \sum_{\mu=1}^{n_A} \sum_{v=1}^{m_B} (C_{i\mu} C_{iv})^2$;</p> <p>б. $E_{AB}^J = 2 \sum_{i=1}^{B3MO} \sum_{\mu=1}^{nA} \sum_{v=1}^{nB} c_{i\mu} c_{iv} S_{\mu\nu} \beta_{\mu\nu}$;</p> <p>в. $E_{AB}^{E,N} = -(Q_A \times Z_B + Q_B Z_A) \gamma_{AB}$;</p> <p>г. $E_{AB}^{E,E} = Q_A \times Q_B \times \gamma_{AB}$;</p> <p>д. $E_{AB}^{N,N} = Z_A \times Z_B \times \gamma_{AB}$</p>	
10.	<p>Соотношение электростатической теоремы Гельмага-Фейнмана:</p> <p>а. $\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \int \Psi^*(\lambda) \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \Psi(\lambda) d\tau$</p> <p>б. $2T + V = 0$</p> <p>в. $2T + V + Rab \frac{d\varepsilon(Rab)}{dRab} = 0$</p>	

Г.	$f_a = \sum_b \frac{Z_a Z_b}{R_{ab}^2} - Z_a \int \frac{\rho(r_a)}{r_a^2} dV$	
----	---	--

12. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

По курсу предполагается проведение промежуточной аттестации в виде модульного контроля, и экзамена. Экзамен сдают студенты с целью повышения рейтинга.

Распределение баллов, которые могут получить студенты в процессе изучения дисциплины

Организационно учебная работа студента	СРС			Всего
	Индивидуальная работа	Модульный контроль	Индивидуальная творческая работа	
Max 50 баллов	max 10 баллов	max 40 баллов		100 баллов

Шкала соответствия баллов национальной шкале

Оценка по шкале ECTS	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)	Оценка по государственной шкале (зачет)
A	90-100	5 (отлично)	зачтено
B	80-89	4 (хорошо)	зачтено
C	75-79	4 (хорошо)	зачтено
D	70-74	3 (удовлетворительно)	зачтено
E	60-69	3 (удовлетворительно)	зачтено
FX	35-59	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи	не зачтено
F	0-34	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	не зачтено

13. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Практические занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийной техникой и доской. Учебная дисциплина обеспечена пособиями и учебно-методическими материалами, с которыми студент имеет возможность работать в читальных залах библиотеки ДОННУ. Чтение лекций, проведение практических занятий проходит в аудиториях химического факультета ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ».

14. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№	Наименование	Кол-во экземпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
	Основная		
1.	Опейда, Й.О. Методологія фізико-хімічних досліджень: конспект лекцій / Й.О. Опейда; Донецький нац. ун-т; Ін-т фіз.-орган. хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН	Электронный ресурс	+

	України. – Донецьк: ДонНУ, 2012. Опейда, И.А. Методология физико-химических исследований: конспект лекций / И.А. Опейда; Донецкий нац. ун-т; Ин-т физ.-орг. химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАН Украины. – Донецк: ДонНУ, 2012.		
2.	Нанотехнологии: азбука для всех / Н.С. Абрамчук, С.М. Авдошенко, А.Н. Баранов и др.; под ред. Ю.Д. Третьякова. – 2-е изд. – Москва: Физматлит, 2009. – 365 с.	2	+
3.	Суздаев, И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И.П. Суздаев. – 2-е изд. – Москва: URSS : Либроком, 2009. – 589 с.	1	+
4.	Опейда, Й.О. Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії / Й.О. Опейда ; Ін-т фізико-орг. хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України. – Донецьк: ДонНУ, 2013. Опейда, И.А. Математическое и компьютерное моделирование в химии / И.А. Опейда; Ин-т физико-орг. химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАН Украины. – Донецк: ДонНУ, 2013.	Электронный ресурс	+
5.	Туровський, М.А. Комп'ютерна структурна хімія: навч. посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. Туровский, Н.А. Компьютерная структурная химия: учебное пособие / Н.А. Туровский, Е. Н. Пастернак; Донецкий нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009.	Электронный ресурс	+
6.	Туровський, М.А. Комп'ютерна структурна хімія [Текст]: навч. посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак; Донецький нац. ун-т. –Донецьк: ДонНУ, 2009. – 153 с. / Туровский, Н.А. Компьютерная структурная химия [Текст]: учебное пособие / Н.А. Туровский, Е.Н. Пастернак; Донецкий нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. – 153 с.	17	+
7.	Опейда, Й.О. Методологія фізико-хімічних досліджень: конспект лекцій / Й.О. Опейда; Донецький нац. ун-т; Ін-т фіз.-орг. хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України. – Донецьк: ДонНУ, 2012. Опейда, И.А. Методология физико-химических исследований: конспект лекций / И.А. Опейда; Донецкий нац. ун-т; Ин-т физ.-орг. химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАН Украины. – Донецк: ДонНУ, 2012.	Электронный ресурс	+
8.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие /Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	10	+
9.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии[Электронный ресурс]: учебное пособие /Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	Электронный ресурс	+
Дополнительная			
10.	Supramolecular reaction of lauroylperoxide with tetraalkylammonium Bromides /N.A. Turovskij at. al. // Oxidation Communications. – 2010. – Vol. 33, № 3. – P. 485-501. http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4318	Электронный ресурс	+

11.	Molecular Design and Reactivity of the 1-Hydroxycycloheptyl Hydroperoxide – Alk_4NBr Complexes / N.A. Turovskij et al. // Handbook of Chemistry, Biochemistry and Biology: New Frontiers / ed.: Shishkina L.N. et al. – New York, 2010. – Chap. 21. – P. 225-233. http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4319	Электронный ресурс	+
12.	Зайцев, С. Ю. Супрамолекулярные наноразмерные системы на границе раздела фаз: концепции и перспективы для бионанотехнологий / С. Ю. Зайцев. – Москва: URSS :ЛЕНАНД, 2010. – 202 с.	1	
13.	Кац, Е.А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры: родословная форм и идей / Е.А. Кац. – Изд. 2-е. – Москва : URSS : ЛИБРООМ, 2009. – 294 с.	1	
14.	Наноккомпозиты металл-ионообменник / Т.А. Кравченко, Л.Н. Полянский, А.И. Калиничев, Д.В. Конев; Российская акад. наук, Институт физ. химии и электрохимии им.А.Н. Фрумкина; Воронежский гос. ун-т. – Москва: Наука, 2009. – 390 с.	1	
15.	Коробов, В.И. Химическая кинетика: введение с Mathcad / Maple/ MCS / В.И. Коробов, В.Ф. Очков. – Москва: Горячая линия - Телеком, 2009. – 384 с.	1	
16.	Третьяков Ю.Д. Основные направления фундаментальных и ориентированных исследований в области наноматериалов / Ю.Д. Третьяков, Е.А. Гудилин // Успехи химии 2009. – Т.78, №9. – С. 867-888	Электронный ресурс	+
17.	Основные направления в технологии получения наноносителей лекарственных веществ [Текст] / К.В. Алексеев, Р.Н. Аляутдин, Е.В. Блынская, Б.Т. Квинх // Вестник новых медицинских технологий. – 2009. – Т. XVI, №2. – С. 142-145.	Электронный ресурс	+
18.	Косолапов В.А. Перспективы и проблемы нанофармакологии [Текст] / В.А. Косолапов, А.А. Спасов // Вестник волгоградского государственного медицинского университета. –2009. – Т.32, №4. – С. 12-16.	Электронный ресурс	+

15. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

<http://mondnr.ru/> – Министерство образования и науки Донецкой Народной Республики
<http://resobrnadzor.ru/> – Республиканская служба по контролю и надзору в сфере образования и науки

16. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO(корпоративная лицензия ДОННУ, лицензия №46484614);
2. WindowsOffice (корпоративная лицензия ДОННУ, лицензия №46472919);
3. MicrosoftVisualStudio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
4. Лицензия GPL, Apach, BSD для свободного программного обеспечения:
 - Антивирус Касперского;
 - Adobe Acrobat Reader.

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры физической химии с изменениями (без изменений) на _____ год.
 Протокол № _____ от « _____ » _____ г.

Заведующий кафедрой _____

В.М. Михальчук