

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ



УТВЕРЖДАЮ:

проректор по научно-методической
и учебной работе

Е.И. Скафа

апреля 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«ФИЗИКО-ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ
АКТИВНЫХ ФОРМ КИСЛОРОДА»

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.

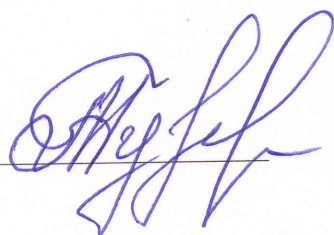
Программа составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) направления подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 655 от 13 июля 2017 г.;

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 «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода» относится к вариативной части Блока 1 «Выбор вуза» (Б1.В.ОД.3)) учебного плана по направлению подготовки 04.04.01 Химия (магистерская программа Химия). Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической химия. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими и сопутствующими дисциплинами: неорганическая, органическая, физическая химия. Дисциплина «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода» является основой для прохождения научной практики и выполнения выпускной работы магистра. Химик, после изучения данной дисциплины, должен обладать способностями и умениями самостоятельно добывать знания из различных источников, систематизировать полученную структурную информацию. Формирование такого умения происходит за счет участия обучающихся в занятиях, выполнения контрольных заданий и тестов, выполнения лабораторных работ, написания курсовых и выпускных квалификационных работ. При этом самостоятельная работа студентов играет решающую роль в ходе всего учебного процесса.

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	1	
Семестр	1	
Количество часов	72	
- лекционных	12	
- практических, семинарских	-	
- лабораторных	12	
- самостоятельной работы	48	
в т.ч. индивидуальное задание		
Недельное количество часов,	6	
в т.ч. аудиторных	2	

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели и задачи

Цель изучения дисциплины «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода» - формирование у студентов системы знаний о механизме реакций образования и распада активных форм кислорода - первичных продуктов окисления пищевых продуктов, медицинских препаратов, процессов окисления, которые протекают в живых организмах.

Задачи дисциплины:

- подготовить химика, который, опираясь на основные концепции атомно-молекулярной архитектуры и электронной структуры молекулярного и супрамолекулярного уровней организации вещества, будет использовать методы структурной химии (методы квантово-химического молекулярного моделирования), как средство получения структурной информации, необходимой составляющей прогноза структуры и реакционной способности разнообразных форм активного кислорода
- 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.
- Раскрыть закономерности механизмов образования и распада активных форм кислорода.

Требования к результатам освоения дисциплины: Процесс изучения дисциплины «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода» 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:

- особенности электронного строения основного и возбужденного состояния молекулярного кислорода;
- современные методологии активации молекулярного кислорода;;
- современные компьютерные технологии прогнозирования структуры и реакционной способности молекулярного кислорода и его активных форм.

уметь:

- получать структурную информацию соединений активных форм кислорода;
- определить статическую и динамическую структуру молекулярного кислорода и его активных форм,
- рассчитать квантово-химические индексы реактивности соединений активных форм кислорода;
- определить равновесную структуру пероксидных соединений активных форм кислорода;
- провести конформационный анализ соединений активных форм кислорода;
- пользуясь концепциями и количественными данными структурной химии, обосновать факты и явления, выявленные при экспериментальном изучении соединений активных форм кислорода;
- владеть состоянием методологии и методов QSAR и уметь использовать их для прогнозирования структуры и реакционной способности соединений активных форм кислорода;
- анализировать полученные результаты, опираясь на знаниях концепций супрамолекулярной структурной химии;
- использовать программы структурной химии для решения задач с участием соединений активных форм кислорода;
- осуществить поиск необходимых физико-химических данных в электронных источниках научной химической информации;
- применять свои знания на практике и владеть навыками работы в современных компьютерных системах;
- проводить поиск структурной информации в современных электронных ресурсах.
- *ориентироваться* в круге основных проблем современного состояния физико-химия процессов с участием активных форм кислорода.

владеть:

- навыками применения основных положений квантовой химии, структурной химии, супрамолекулярной химии, компьютерной химии для анализа свойств соединений активных форм кислорода.
- 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
Содержательный модуль 1.	
Тема 1. Молекулярный кислород и его активные формы.	Строение и реакционная способность молекулярного кислорода в реакциях окисления. Роль спина в химических реакциях с участием кислорода. Активные формы кислорода. Электронные механизмы активации молекулярного кислорода. Биохимическая активация молекулярного кислорода. Активные формы связанного кислорода. Электронная структура и функции соединений содержащих пероксидную группу.
Тема 2. Молекулярная структура и реакции образования соединений связанного активного кислорода.	Пероксид водорода: молекулярная структура и реакции образования. Гидропероксиды: молекулярная структура и реакции образования. Пероксикислоты: молекулярная структура и реакции образования. Сульфопероксикислоты: молекулярная структура и реакции образования. Пероксиды алкилов и аралкилов: молекулярная структура и реакции образования. Пероксиэфиры: молекулярная структура и реакции образования. Пероксиды ацилов: молекулярная структура и реакции образования. Пероксидные производные карбонильных соединений: молекулярная структура и реакции образования. Пероксикетали: молекулярная структура и реакции образования. Циклические пероксиды: молекулярная структура и реакции образования. Диоксираны: молекулярная структура и реакции образования. 1,2-Диоксетаны: молекулярная структура и реакции образования. Элементорганические пероксиды: молекулярная структура и реакции образования. Триоксиды: молекулярная структура и реакции образования. Тетраоксиды: молекулярная структура и реакции образования. Окси- и пероксирадикалы.
Тема 3. <u>Ключевая роль соединений связанного активного кислорода в радикально-цепных процессах.</u>	Ключевая роль пероксидов в радикально-цепных процессах окисления и полимеризации. Структурирование и вулканизация полимеров с помощью пероксидов, Пероксидный способ получения фенола и ацетона из кумола. Пероксиды как окислительные реагенты: эпоксицирование олефинов гидропероксидами (халкон-процесс); эпоксицирование олефинов пероксикислотами.
Тема 4.	Атмосфера как многокомпонентная химическая система. Фотохимический баланс O_2 , RO_2^{\cdot} , RO_2^{\cdot} и озона

Химия радикальных активных форм кислорода в земной атмосфере	в стратосфере. Реакции RO^{\bullet} и RO_2^{\bullet} в тропосфере и окисление углеводородов. Тропосферный озон. Фотохимический смог; источники метана и оксидов азота в атмосфере. Фотохимический цикл реакций молекулярного кислорода в атмосфере. Образование и распад соединений связанного активного кислорода в атмосфере. Процессы образования пероксинитратов при смоговых ситуациях, их роль в химии атмосферы
Тема 5. Роль активных форм кислорода в химии горения.	Механизм реакции горения и окисления органических соединений. Пероксидные промоторы к топливу для авиационной и ракетно-космической техники. Пероксидное топливо для ракетно-космической техники.
Тема 6. Активные формы кислорода и окислительная модификация макромолекул: польза, вред и защита.	Окислительный стресс и его последствия. Пероксидное окисление липидов. Образование и распад пероксидных соединений в процессе окислительной модификации ДНК супероксидным анион-радикалом. Образование и распад пероксидных соединений в процессе окислительной модификации молекул протеина. Токсичность пероксидных соединений. Фитотоксичность органических пероксидов.
Тема 7. Медицинская химия соединений связанного активного кислорода.	Природные пероксидные соединения. Медицинская химия артемизинина. Строение артемизинина. Синтез артемизинина. Производные и аналоги артемизинина. Физико-химические характеристики артемизинина. Генерирование радикалов реакцией артемизинина с соединениями железа(II). Продукты превращения алкоксильных радикалов артемизинина в анаэробных условиях. Квантово-химические расчеты реакций алкоксильных радикалов артемизинина. Конкуренция моно- и бимолекулярных реакций алкоксильных радикалов, образующихся из артемизинина. Реакции алкильных радикалов артемизинина. Цепная внутримолекулярная реакция окисления артемизинина. Окисленный артемизинин как полифункциональный инициатор. Медицинская химия

Тематический план

Содержательный модуль 1						
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов					
	Очная форма обучения					
	В т.ч.					
	всего	лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 1.	12	2		2	8	

Молекулярный кислород и его активные формы.						
Тема 2. Молекулярная структура и реакции образования соединений связанного активного кислорода.	10	2		2	6	
Тема 3. <u>Ключевая роль соединений связанного активного кислорода в радикально-цепных процессах.</u>	10	2		2	6	
Тема 4. Химия радикальных активных форм кислорода в земной атмосфере	10	2		2	6	
Тема 5. Роль активных форм кислорода в химии горения.	10	2		2	6	
Тема 6. Активные формы кислорода и оксидативная модификация макромолекул: польза, вред и защита.	10	1		1	8	
Тема 7. Медицинская химия соединений связанного активного кислорода.	10	1		1	8	
Итого <i>по содержательному модулю 1</i>	72	12	-	12	48	

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

(Практические занятия не предусмотрены учебным планом)

ТЕМЫ ЛЕКЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название темы	Количество часов
1	Молекулярный кислород и его активные формы.	2
2	Молекулярная структура и реакции образования соединений связанного активного кислорода.	2
3	Ключевая роль соединений связанного активного кислорода в радикально-цепных процессах.	2
4	Химия радикальных активных форм кислорода в земной атмосфере	2
5	Роль активных форм кислорода в химии горения.	2
6	Активные формы кислорода и оксидативная модификация макромолекул: польза, вред и защита.	2
	ВСЕГО	12

ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1.	Молекулярная структура гидропероксидных АФК	2
2.	Молекулярная структура эндопероксидных АФК	2
3.	Молекулярная структура оксирановых АФК	2
4.	Конформационный анализ пероксидных АФК	2
5.	QSAR природных пероксидных АФК. Противомаларийная активность производных артемизинина	2
6.	QSAR пероксидных АФК. Антибактериальная активность пероксидных АФК.	2
	ВСЕГО	12

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

№ п/п	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1.	Молекулярный кислород и его активные формы.	4
	Индивидуальная работа (п. 1)	4
2.	Молекулярная структура и реакции образования соединений связанного активного кислорода.	3
	Индивидуальная работа (п. 2)	3
3.	Ключевая роль соединений связанного активного кислорода в радикально-цепных процессах.	3
	Индивидуальная работа (п. 3)	3
4.	Химия радикальных активных форм кислорода в земной атмосфере	3
	Индивидуальная работа (п. 4)	3
5.	Роль активных форм кислорода в химии горения.	3
	Индивидуальная работа (п. 9)	3
6.	<i>Активные формы кислорода и оксидативная модификация макромолекул: польза, вред и защита</i>	4
	Индивидуальная работа (п. 7)	3
	Индивидуальная работа (п. 8)	3
7.	<i>Медицинская химия соединений связанного активного кислорода.</i>	3
	Индивидуальная работа (п. 5)	3
	Индивидуальная работа (п. 6)	3
	ВСЕГО	48

7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

Индивидуальная работа

Цель: овладеть теорией и практикой физико-химии процессов с участием активных форм кислорода.

1 В приближении AM1, RM1 и PM3 полуэмпирической квантовой химии в режиме оптимизации молекулярной геометрии определить равновесное состояние молекулярного кислорода в синглетном электронном состоянии ($^1\text{O}_2$) и в триплетном электронном состоянии ($^4\text{O}_2$). Обосновать какое из электронных состояний молекулярного кислорода является основным.

Представить систему МО молекулярного кислорода в триплетном и синглетном электронном состоянии, которые получены в приближении AM1, RM1 и PM3 полуэмпирической квантовой химии. Провести сравнительный анализ энергетического расположения МО и распределения электронов в триплетном и синглетном электронном состоянии. Определить тип синглетного электронного состояния.

2. Освоить методику расчета термодинамических параметров (энтропии и свободной энергии Гиббса) химических соединений при заданной температуре (использовать комплекс программ структурной химии Nupur Chem 8). Освоить методику расчета колебательного спектра химических соединений (использовать комплекс программ структурной химии Nupur Chem 8). Освоить методику расчета QSAR параметров химических соединений (использовать комплекс программ структурной химии Nupur Chem 8). Получить равновесную молекулярную структуру пероксида водорода. Провести квантово-химический расчет пероксида водорода при температуре 298 К. Рассчитать QSAR параметры. Полученные результаты обобщить в таблицах.

3. Получить равновесную молекулярную структуру оксирадикалов (RO^\bullet), которые образуются в результате гомолитического разрыва $-\text{O}-\text{O}-$ связи исследуемого ряда пероксидов:



Провести квантово-химический расчет исследуемых объектов при температуре 298 К.

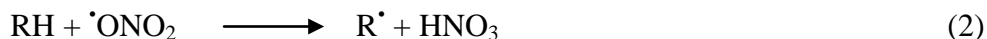
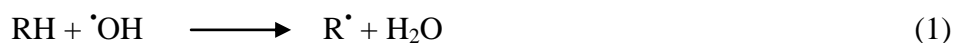
Объекты для индивидуальной работы

AM1 метод			RM1 метод		
вариант	R ₁	R ₂	вариант	R ₁	R ₂
1.	CH ₃	H	11.	CH ₃	H
2.	C ₂ H ₅	H	12.	C ₂ H ₅	H
3.	Ph	H	13.	Ph	H
4.	цикло-C ₆ H ₁₁	H	14.	цикло-C ₆ H ₁₁	H
5.	C ₁₁ H ₂₃	H	15.	C ₁₁ H ₂₃	H
6.	CH ₃	CH ₃	16.	CH ₃	CH ₃
7.	C ₂ H ₅	CH ₃	17.	C ₂ H ₅	CH ₃
8.	Ph	CH ₃	18.	Ph	CH ₃
9.	цикло-C ₆ H ₁₁	CH ₃	19.	цикло-C ₆ H ₁₁	CH ₃
10.	C ₁₁ H ₂₃	CH ₃	20.	C ₁₁ H ₂₃	CH ₃

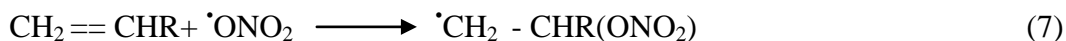
4. Пероксидные источники АФК и сами АФК, в том числе окси- и перокси-радикалы, принимают в этих превращениях непосредственное участие. Органические молекулы реагируют с активными радикалами, в первую очередь с гидроксилом, образуя углеродцентрированные радикалы.

Провести методом PM3 квантовохимический расчет реактантов и продуктов реакций 3-5 в режиме оптимизации молекулярной геометрии при 298 С. Рассчитать ΔЕ реакций (1-7) при 0

К. Рассчитать ΔE реакций (1-7) при 298 К. Рассчитать ΔH реакций (1-7) при 298К. Рассчитать ΔG реакций (1-7) при 298К



С олефином реализуется и реакция присоединения.



Спирты, эфиры, органические кислоты и другие соединения образуют соответствующие углеродцентрированные радикалы $>C\cdot OH$. В воздухе с низким содержанием углеводов в основном присутствуют гидроксильные ($HO\cdot$) и гидропероксильные ($HO_2\cdot$) радикалы, которые, реагируя с углеводородами RH и O_3 , быстро могут превращаться в пероксирадикалы $RO_2\cdot$.

5. Обосновать бактерицидный эффект соединений связанного активного кислорода.
6. Обосновать биохимическое действие артемизина на малярийный плазмодий.
7. Обосновать схемы образования и распада соединений связанного активного кислорода.
8. Обосновать схему образования активных форм кислорода и окислительной модификации молекул.
9. Предложить и обосновать схему процесса горения.

8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ.

1. Молекулярный кислород и его активные формы.
2. Электронная структура атмосферного молекулярного кислорода в основном электронном состоянии.
3. Активные формы кислорода.
4. Электронная структура синглетного молекулярного кислорода.
5. Физико-химические свойства синглетного молекулярного кислорода.
6. Принцип спинового запрета реакций окисления органических веществ молекулярным кислородом в основном электронном состоянии.
7. Химические реакции с участием синглетного молекулярного кислорода.
8. Электронные механизмы и продукты активации молекулярного кислорода.
9. Пероксидная теория Баха–Энглера биохимической активации молекулярного кислорода.
10. Молекулярная структура и реакции образования соединений связанного активного кислорода.
11. Полиоксидные источники радикальных АФК.
12. Структура и функции полиоксидных источников радикальных АФК.
13. Строение, реакции образования и разложения пероксида водорода.

14. Строение, реакции образования разложения гидропероксидов.
15. Строение, реакции образования и разложения пероксикислот.
16. Строение, реакции образования и разложения 1,2-диоксетанов.
17. Строение, реакции образования и разложения триоксида водорода.
18. Ключевая роль соединений связанного активного кислорода в радикально-цепных процессах.
19. Функциональная роль пероксидных источников АФК.
20. Ключевая роль пероксидных источников АФК в радикально-цепных процессах полимеризации, окисления и окислительной порчи органических продуктов и материалов.
21. Использование пероксидных источников АФК в химических процессах.
22. Промышленное производство пероксидных источников АФК.
23. Применение пероксидных источников АФК в качестве инициаторов свободнорадикальных процессов.
24. Термостойкость промышленных пероксидных источников АФК в растворе.
25. Пероксидные источники АФК - химический источник свободных радикалов.
26. Химически активированный радикальный распад пероксидных источников АФК.
27. Химическая активация пероксидных источников АФК.
28. Химизм процесса структурирования и вулканизации полимеров с использованием пероксидных источников АФК.
29. Химизм процесса окисления органических соединений пероксидными источниками АФК.
30. Химизм процесса получения фенола и ацетона из кумола пероксидным способом.
31. Химизм процесса получения резорцина пероксидным способом.
32. Химизм процесса получения окиси пропилена. *Халкон-процесс*.
33. Химизм процесса получения окиси пропилена пероксидным способом. *Реакция Прилежаева*.
34. Химизм процесса получения H_2O_2 из изопропилового спирта.
35. Химизм процесса получения H_2O_2 из алкилантрагидрохинонов.
36. Химизм процесса получения HO_2OH из алкилантрагидрохинонов.
37. Химизм процесса отбеливания пшеничной муки пероксидными источниками АФК.
38. Химизм процесса осветления эмали зубов пероксидными источниками АФК.
39. Химизм процесса отбеливания тканей и бумаги пероксидными источниками АФК.
40. Химизм процесса отбеливающего действия персоли
41. Химия радикальных активных форм кислорода в земной атмосфере.
42. Атмосфера Земли - гигантский химический реактор образования и превращения АФК.
43. Основные процессы образования АФК при смоговых ситуациях, их роль в химии атмосферы
44. Основные компоненты фотохимического смога.
45. Источники атмосферного метана.
46. Источники загрязнения атмосферы оксидами азота.
47. Фотохимические процессы в атмосфере с участием озона и АФК.
48. Фотохимические процессы в атмосфере с участием фреонов и АФК.
49. Фотохимические процессы в атмосфере с участием CO и АФК.
50. Фотохимические процессы в атмосфере с участием NO_2 и АФК.
51. Фотохимические радикально-цепные процессы в атмосфере с участием углеводородов и АФК.

52. Образование и распад пероксидов в атмосфере.
53. Атмосферные физико-химические процессы гидропероксидов с озоном
54. Реакции атмосферной хими гидроксильного радикала с углеводородами.
55. Реакции атмосферной хими оксида азота(ONO_2) с углеводородами.
56. Реакции атмосферной хими гидропероксильного радикала с углеводородами.
57. Реакции О-центрированных радикалов с олефинами.
58. Методология определения энергии диссоциации химической связи пероксинитратных соединений.
59. Роль активных форм кислорода в химии горения.
60. Реакции горения и окисления органических соединений с участием АФК.
61. Химизм действия пероксидных источников АФК в качестве промоторов к дизельному топливу.
62. Химизм действия пероксидных источников АФК в качестве промоторов к топливу для авиационной и ракетно-космической техники.
63. Химизм действия пероксидных источников АФК в качестве пролетонаторов к топливу для авиационной и ракетно-космической техники.
64. Химизм действия пероксидных источников АФК в качестве топлива для ракетно-космической техники.
65. Химизм действия пероксидных источников АФК в пероксидных торпедах.
66. Активные формы кислорода и оксидативная модификация макромолекул: польза, вред и защита.
67. Активные формы кислорода и пероксидная модификация макромолекул: польза, вред и защита.
68. Биологическая активность пероксидных АФК.
69. Реакции образования активных форм кислорода в биологических системах.
70. Реакции образования и распада пероксида водорода в биологических системах.
71. Пероксидная модификация биомолекул и биологические последствия.
72. Пероксидная модификация липидов в биологических системах.
73. Механизм Рассела пероксидного окисления липидов.
74. Пероксидная модификация ДНК при участии синглетного кислорода.
75. Пероксидная модификация ДНК. Роль супероксидного анион-радикала.
76. Химизм процесса пероксидной модификации молекул протеина иницированной гидроксильными радикалами.
77. Химизм процесса пероксидной модификации молекул протеина при участии синглетного кислорода.
78. Пероксидный стресс. Метаболизм этанола в печени.
79. АФК табачного дыма, последствия их действия
80. Медицинская химия соединений связанного активного кислорода.
81. Строение и биологическая активность артемизинина, природного пероксидного источника АФК.
82. Химизм антималярийного действия артемизинина.
83. Строение и биологическая активность антигельментного препарата- аскаридола, природного пероксидного источника АФК.
84. Области применения в медицине пероксида бензоила, пероксидного источника АФК.
85. Химизм действия пероксида бензоила в прцессе иницированной полимеризации костного цемента и зубных смол.
86. Биологическая активность пероксида бензоила, препарата противомикробного действия

для лечения угревой сыпи.

87. Химизм пероксидной модификации ДНК и липидов АФК, которые генерирует в организме пероксид бензоила.

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: **Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода**

МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА

ВАРИАНТ №1

1. Химизм процесса пероксидной модификации молекул протеина инициированной гидроксильными радикалами.
2. Химизм процесса пероксидной модификации молекул протеина при участии синглетного кислорода.
3. Пероксидный стресс. Метаболизм этанола в печени.

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. Электронная структура и свойства молекулярного кислорода в основном электронном состоянии.
2. Электронная структура и свойства молекулярного кислорода в возбужденном электронном состоянии.
3. Активные формы кислорода.
4. Принцип спинового запрета химических **реакций**.
5. Механизм *redox* активации молекулярного кислорода.

6. Супрамолекулярный механизм биохимической активации молекулярного кислорода.
7. Химические реакции с участием синглетного молекулярного кислорода.
8. Пероксид водорода: молекулярная структура и реакции образования.
9. Гидропероксиды: молекулярная структура и реакции образования.
10. Пероксикислоты: молекулярная структура и реакции образования.
11. Сульфопероксикислоты: молекулярная структура и реакции образования.
12. Пероксиды алкилов и аралкилов: молекулярная структура и реакции образования.
13. Пероксиэфиры: молекулярная структура и реакции образования.
14. Пероксикетали: молекулярная структура и реакции образования.
15. Циклические пероксиды: молекулярная структура и реакции образования.
16. Диоксираны: молекулярная структура и реакции образования.
17. 1,2-Диоксетаны: молекулярная структура и реакции образования.
18. Элементорганические пероксиды: молекулярная структура и реакции образования.
19. Триоксиды: молекулярная структура и реакции образования.
20. Тетраоксиды: молекулярная структура и реакции образования.
21. Окси- и пероксирадикалы.
22. Молекулярная структура пероксида водорода.
23. Зависимость длины связей О-О и С-О от конформации пероксидного фрагмента.
24. Аномерный эффект в пероксидах
25. *d*-Эффект в пероксидах.
26. *цис*- и *транс*- барьеры втутреннего вращения вокруг пероксидной связи.
27. Методология определения переходного состояния реакции гомолиза пероксидов.
28. Неподделенные электронные пары атомов кислорода пероксидной связи.
29. NBO-анализ аномерного эффекта в пероксидах.
30. Условия и кинетические методы исследования термоллиза пероксидов.
31. Кинетические параметры термоллиза пероксидов.
32. Период полураспада пероксидных инициаторов.
33. Активационные параметры термоллиза пероксидов в приближении Аррениуса.
34. Активационные параметры термоллиза пероксидов в приближении Эйринга.
35. Взаимосвязь ΔH^\ddagger и E_a , ΔS^\ddagger и $\lg A$ в реакциях термоллиза пероксидов.
36. Объем активации пероксидов в реакциях их термоллиз нерадикальному перициклическому механизму.
37. Объем активации пероксидов в реакциях их индуцированного распада.
38. Объем активации пероксидов в реакциях их термоллиза с согласованным распадом по двум связям.
39. Объем активации диацилпероксидов в реакции термоллиза.
40. Объем активации пероксидикарбонатов в реакции термоллиза
41. Информационное содержание понятия «механизм химической реакции».
42. Радикально-парный распад пероксидов в реакциях их термоллиза.
43. Каскадный радикально-парный распад пероксидов.
44. Влияние молекулярного кислорода в реакциях термоллиза пероксидов.
45. Согласованный радикально-парный распад пероксидов.
46. Согласованный распад с α -С-Н- пероксидов.
47. Индуцированный распад пероксидов.
48. Ключевая роль пероксидов в радикально-цепных процессах окисления и полимеризации.
49. Структурирование и вулканизация полимеров с помощью пероксидов,
50. Пероксидный способ получения фенола и ацетона из кумола.
50. Пероксиды как окислительные реагенты: эпоксирирования олефинов гидропероксидами (халкон-процесс); эпоксирирование олефинов пероксикислотами.
51. Атмосфера как многокомпонентная химическая система.
52. Фотохимический баланс O_2 , RO^\bullet , RO_2^\bullet и озона в стратосфере.

53. Реакции RO^{\bullet} и RO_2^{\bullet} в тропосфере и окисление углеводородов.
54. Тропосферный озон.
55. Фотохимический смог; источники метана и оксидов азота в атмосфере.
56. Фотохимический цикл реакций молекулярного кислорода в атмосфере.
57. Образование и распад соединений связанного активного кислорода в атмосфере.
58. Процессы образования пероксинитратов при смоговых ситуациях, их роль в химии атмосферы.
59. Механизм реакции горения и окисления органических соединений.
60. Пероксидные промоторы к топливу для авиационной и ракетно-космической техники.
61. Пероксидное топливо для ракетно-космической техники.

62. Активные формы кислорода и пероксидная модификация макромолекул: польза, вред и защита.
63. Биологическая активность пероксидных АФК.
64. Реакции образования активных форм кислорода в биологических системах.
65. Реакции образования и распада пероксида водорода в биологических системах.
66. Пероксидная модификация биомолекул и биологические последствия.
67. Пероксидная модификация липидов в биологических системах.
68. Механизм Рассела пероксидного окисления липидов.
69. Пероксидная модификация ДНК при участии синглетного кислорода.
70. Пероксидная модификация ДНК. Роль супероксидного анион-радикала.
71. Химизм процесса пероксидной модификации молекул протеина иницированной гидроксильными радикалами.
72. Химизм процесса пероксидной модификации молекул протеина при участии синглетного кислорода.
73. Пероксидный стресс. Метаболизм этанола в печени.
74. АФК табачного дыма, последствия их действия.
75. Токсичность пероксидных соединений.
76. Фитотоксичность органических пероксидов.
77. Строение и биологическая активность артемизинина, природного пероксидного источника АФК.
78. Химизм антималярийного действия артемизинина.
79. Строение и биологическая активность антигельментного препарата- аскаридола, природного пероксидного источника АФК.
80. Области применения в медицине пероксида бензоила, пероксидного источника АФК.
81. Химизм действия пероксида бензоила в процессе иницированной полимеризации костного цемента и зубных смол.
82. Биологическая активность пероксида бензоила, препарата противомикробного действия для лечения угревой сыпи.
83. Химизм пероксидной модификации ДНК и липидов АФК, которые генерирует в организме пероксид бензоила.

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

Направление подготовки:

04.04.01 Химия

Магистерская программа:

химия

Программа подготовки

академическая магистратура

Семестр

1

Учебная дисциплина

**Физико-химия процессов с участием
активных форм кислорода**

БИЛЕТ №1

1. Активные формы кислорода и пероксидная модификация макромолекул: польза, вред и защита.
2. Биологическая активность пероксидных АФК.
3. Реакции образования активных форм кислорода в биологических системах.
4. Реакции образования и распада пероксида водорода в биологических системах.
5. Пероксидная модификация биомолекул и биологические последствия.

Утверждено на заседании кафедры физической химии.

Протокол № ____ от «__» _____ 20__ года

Заведующий кафедрой _____

Экзаменатор _____

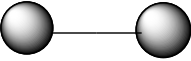
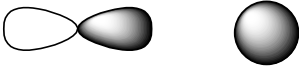
Критерии оценивания экзамена

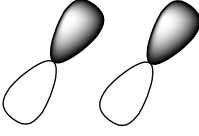
Номер задания	Количество баллов
Задание 1	25
Задание 2	М
Задание 3	М
Задание 4	М
Задание 5	М
Всего	100

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.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_1)</p> $\psi_1 = \dots + c_{11}\phi_{S(A)} + c_{12}\phi_{S(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада в образование химической связи s – АО, которые центрированы на атомах А и В.</p> <ol style="list-style-type: none"> а. связывающий вклад; б. атисвязывающий вклад. в. несвязывающий вклад. 	

3.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_2)</p> $\Psi_2 = \dots - c_{21}\phi_{px(A)} + c_{22}\phi_{px(B)} + \dots$ <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. антивсвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад.</p>	
4.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_2)</p> $\Psi_2 = \dots - c_{21}\phi_{px(A)} + c_{22}\phi_{px(B)} + \dots$ <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. антивсвязывающий вклад; в. Несвязывающий вклад.</p>	
5.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_1)</p> $\psi_1 = \dots + c_{11}\phi_{s(A)} + c_{12}\phi_{px(B)} + \dots$ <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. антивсвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад.</p>	
6.	<p>S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию.</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\phi_{s(A)}$ и $c_{22}\phi_{s(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\phi_{s(A)} \dots c_{22}\phi_{s(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антивсвязывающую; в. несвязывающую. г. - $c_{21}\phi_{s(A)}$; д. + $c_{21}\phi_{s(A)}$; е. - $c_{22}\phi_{s(B)}$; ж. + $c_{22}\phi_{s(B)}$.</p>	
7.	<p>рх 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> $\Psi_2 = \dots c_{21}\phi_{px(A)} \dots c_{22}\phi_{s(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антивсвязывающую;</p>	

	<p>В. несвязывающую.</p> <p>Г. $-c_{21}\varphi_{P_x(A)}$;</p> <p>Д. $+c_{21}\varphi_{P_x(A)}$;</p> <p>Е. $-c_{22}\varphi_{S(B)}$;</p> <p>Ж. $+c_{22}\varphi_{S(B)}$.</p>	
8.	<p>P_z АО центрированы на атомах А и В и образуют ... π-комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{P_z(A)}$ и $c_{22}\varphi_{P_z(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{P_z(A)} \dots c_{22}\varphi_{P_z(B)} +$ <p>а. связывающую;</p> <p>б. антисвязывающую;</p> <p>в. несвязывающую.</p> <p>Г. $-c_{21}\varphi_{P_z(A)}$;</p> <p>Д. $+c_{21}\varphi_{P_z(A)}$;</p> <p>Е. $-c_{22}\varphi_{P_z(B)}$;</p> <p>Ж. $+c_{22}\varphi_{P_z(B)}$.</p>	
9.	<p>Энергия резонансного орбитального взаимодействия атомов А и В вычисляется по выражению:</p> <p>а. $E_{AB}^k = -\frac{1}{2} \gamma_{AB} \sum_{i=1}^{\hat{A}} \sum_{\mu=1}^{n_A} \sum_{v=1}^{m_B} (C_{i\mu} C_{iv})^2$;</p> <p>б. $E_{AB}^J = 2 \sum_{i=1}^{B3MO} \sum_{\mu=1}^{n_A} \sum_{v=1}^{n_B} c_{i\mu} c_{iv} S_{\mu\nu} \beta_{\mu\nu}$;</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> <p>г. $f_a = \sum_b \frac{Z_a Z_b}{R_{ab}^2} - Z_a \int \frac{\rho(r_a)}{r_a^2} dV$</p>	

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

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийной техникой и доской. Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе, оборудованном компьютерами с лицензионным программным обеспечением, доступом к сети Интернет, столами, доской. Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета

14. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№	Наименование	Кол-во экземпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
	Основная		
1.	Non-Valency Interaction in Organic Peroxides Homolysis Reactions / A.A. Turovsky, L.I. Bazylyak, A.R. Kytsya, N. A. Turovsky, G. E. Zaikov. – New York : Nova Science Publishers, Inc., 2012. – 250 p. http://library.donnu.ru/catalog/	Электронный ресурс	+
2.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие /Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	10	
	Дополнительная		
3.	Supramolecular reaction of lauroyl peroxide with tetraalkyl ammonium bromides / N.A. Turovskij et al. // Oxidation Communications. – 2010. – Vol. 33, № 3. – P. 485-	Электронный ресурс	+

	501. http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4318		
4.	Molecular Design and Reactivity of the 1-Hydroxycycloheptyl Hydroperoxide – Alk ₄ NBr 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	+
5.	Квантовохимическое исследование механизмов окисления диметилсульфида пероксидом водорода и пероксоборатами / С.Л. Литвиненко, В.Л. Лобачев, Л.М. Дятленко, Н.А. Туровский // Теоретическая и экспериментальная химия. – 2011. – Т. 47, № 1. – С. 1-7. http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4320	Электронный ресурс	–+
6.	Кузнецова А.А. Окисление ДНК и ее компонентов активными формами кислорода [Текст] / А.А. Кузнецова, Д.Г. Кнорре, О.С. Федорова // Успехи химии. – 2009. – Т. 78, № 7. – С. 714-734.	Электронный ресурс	+
7.	<u>Денисов Е.Т.</u> Радикальная химия артемизинина [Текст] / <u>Е.Т. Денисов</u> , <u>С.Л. Солодова</u> , <u>Т.Г. Денисова</u> // Успехи химии. – 2010. – Т. 79, № 11. – С. 1065 – 1088.	Электронный ресурс	+
8.	Колупаев Ю. Е. Активные формы кислорода и стрессовый сигналинг у растений [Текст] / Ю. Е. Колупаев, Ю. В. Карпец // Ukrainian biochemical journal . – 2014. – Vol. 86, № 4. – С. 18-35. Режим доступа: http://nbuv.gov.ua/UJRN/BioChem_2014_86_4_4	Электронный ресурс	+
9.	Логинова А.Ю. Роль активных форм кислорода в процессах самоочищения природных водных экосистем [Текст] / А.Ю. Логинова, Н.А. Силаева// Журнал актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук . – 2015. – № 4-1. – С. 48-51.	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. Microsoft Visual Studio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
4. Лицензия GPL, Apache, 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