

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра физической химии

УТВЕРЖДАЮ:

Профессор по научно-методической  
и учебной работе

Е.И. Скафа



2017 г.

Рабочая программа учебной дисциплины  
**«ФИЗИКО-ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ  
АКТИВНЫХ ФОРМ КИСЛОРОДА»**

|                         |                            |
|-------------------------|----------------------------|
| Направления подготовки: | 04.04.01 Химия             |
| Магистерская программа: | химия                      |
| Программа подготовки:   | академическая магистратура |
| Квалификация:           | магистр                    |
| Форма обучения:         | очная                      |

Донецк 2017

**УТВЕРЖДАЮ:**

Декан химического факультета

А.В. Белый



2017 г.

Программа составлена с учетом Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 23 сентября 2015 г. № 1042.

Программа учебной дисциплины «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода» составлена на основе ГОС ВПО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР от «20» апреля 2016 г. № 459, зарегистрированного в Министерстве юстиции ДНР от 17 мая 2016 г. № 1277, «Положения об организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики», утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР 07 августа 2015 г. № 380 (с изменениями и дополнениями от 30 октября 2015 г. № 750), учебного плана по направлению подготовки 04.04.01 Химия (Магистерская программа: Химия), утвержденного Ученым Советом Университета от 31.03.2017 г., протокол № 3 и основной образовательной программы, утвержденной приказом ректора (№ 77/05 от 06.05 2017 г.).

Разработчик:

Кандидат химических наук,  
Доцент кафедры физической  
химии

Н.А. Туровский

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии.

Протокол № 17 от «08» июня 2017 г.

Заведующий кафедрой

В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 8 от «14» июня 2017 г.

Председатель учебно-методической комиссии химического факультета

Н.В. Яблочкова

## 1. Область применения и место дисциплины в учебном процессе:

Учебная дисциплина «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода» входит в вариативную часть профессионального блока дисциплин подготовки студентов по направлению подготовки **04.04.01 Химия**. Дисциплина «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода»:

- реализуется на химическом факультете ДонНУ кафедрой физической химии;
- основывается на базе дисциплин государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по направлению подготовки «Магистр» - физическая и органическая химия, квантовая, структурная и супрамолекулярная химия; информатика, является основой для прохождения научной практики и выполнения выпускной работы магистра.

## 2. Структура дисциплины

| <i>Характеристика учебной дисциплины</i>                         |                                 |                        |
|------------------------------------------------------------------|---------------------------------|------------------------|
| Направление подготовки                                           | 44.04.01 Химия                  |                        |
| Магистерская программа                                           | химическое образование          |                        |
| Программа подготовки                                             | академическая магистратура      |                        |
| Квалификация                                                     | магистр                         |                        |
| Количество содержательных модулей                                | 1                               |                        |
| Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы | дисциплина вариативной части    |                        |
| Формы контроля                                                   | 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.

**Целью изучения** дисциплины «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода» является 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 «Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода» - раскрыть закономерности механизмов образования и распада активных форм кислорода подготовить специалиста - 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.

**Главной задачей самостоятельной работы** является самоорганизация процесса обучения со стороны студентов, позволяющая эффективно прорабатывать теоретический материал, качественно готовиться к практическим занятиям с тем, чтобы сформировать компетенции, которые дадут возможность будущим выпускникам на высоком уровне применять в профессиональной деятельности полученные знания, умения и навыки.

Процесс самостоятельной работы способствует формированию таких социально-личностных компетенций, как настойчивость в достижении цели; способность перерабатывать большие объемы информации и выделять главное; развитая устная и письменная коммуникации; умение критически переосмысливать свой социальный опыт.

**Требования к уровню освоения содержания дисциплины:** процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ГОС ВПО по данному направлению подготовки (специальности):

**а) Общекультурные компетенции:**

– готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения (ОК-2).

**б) Общепрофессиональные компетенции:**

– способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);

– владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ОПК-2);

– способность реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях (ОПК-3);

– готовность к коммуникации в устной и письменной формах на государственном языке и иностранном языке для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-4).

**в) Профессиональные компетенции**

– способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1);

– владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);

– готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3);

– способность 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).

**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 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 знания 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-химии 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.

Специалист – химик, после изучения данной дисциплине, 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 выпускных квалификационных работ. При этом самостоятельная работа студентов играет решающую роль в ходе всего учебного процесса.

#### **4. Содержание дисциплины и формы организации учебного процесса**

| <b>Порядковый номер и наименование темы</b>                                                                | <b>Краткое содержание темы</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b><i>Содержательный модуль 1.</i></b>                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| <i>Тема 1.<br/>Молекулярный кислород и его активные формы.</i>                                             | 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. |
| <i>Тема 2.<br/>Молекулярная структура и реакции образования соединений связанного активного кислорода.</i> | Пероксид водорода: молекулярная структура и реакции образования. Гидропероксиды: молекулярная структура и реакции образования. Пероксикислоты: молекулярная структура и реакции образования. Сульфопероксикислоты: молекулярная структура и                                                                                                                                                |

|                                                                                                                           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                                                           | <p>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.</p> |
| <p><i>Тема 3.</i><br/><i>Ключевая роль соединений связанного активного кислорода в радикально-цепных процессах.</i></p>   | <p>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: эпоксидирования олефинов гидропероксдами (халкон-процесс); эпоксидирование олефинов пероксикислотами.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| <p><i>Тема 4.</i><br/><i>Химия радикальных активных форм кислорода в земной атмосфере.</i></p>                            | <p>Атмосфера как многокомпонентная химическая система. Фотохимический баланс <math>O_2</math>, <math>RO^\cdot</math>, <math>RO_2^\cdot</math> и озона в стратосфере. Реакции <math>RO^\cdot</math> и <math>RO_2^\cdot</math> 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</p>                                                                                                                                                                                                                      |
| <p><i>Тема 5.</i><br/><i>Роль активных форм кислорода в химии горения.</i></p>                                            | <p>Механизм реакции горения и окисления органических соединений. Пероксидные промоторы к топливу для авиационной и ракетно-космической техники. Пероксидное топливо для ракетно-космической техники.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| <p><i>Тема 6.</i><br/><i>Активные формы кислорода и оксидативная модификация макромолекул: польза, вред и защита.</i></p> | <p>Оксидативный стресс и его последствия. Пероксидное окисление липидов. Образование и распад пероксидных соединений в процессе оксидативной модификации ДНК супероксидным анион-радикалом. Образование и распад пероксидных соединений в процессе оксидативной модификации молекул протеина. Токсичность пероксидных соединений. Фитотоксичность органических пероксидов.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| <p><i>Тема 7.</i><br/><i>Медицинская химия соединений связанного активного кислорода.</i></p>                             | <p>Природные пероксидные соединения. Медицинская химия артемизинина. Строение артемизинина. Синтез артемизинина. Производные и аналоги артемизинина.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | 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. Конкуренцияmono- 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

| Названия содержательных модулей и тем                                                            | Содержательный модуль 1 |           |              |              |                        |                       |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|-----------|--------------|--------------|------------------------|-----------------------|
|                                                                                                  | Количество часов        |           |              |              |                        |                       |
|                                                                                                  | Очная форма обучения    |           |              |              |                        |                       |
|                                                                                                  | всего                   | лекции    | практические | лабораторные | самостоятельная работа | индивидуальная работа |
| Тема 1. Молекулярный кислород и его активные формы.                                              | 18                      | 2         |              | 2            | 14                     |                       |
| Тема 2. Молекулярная структура и реакции образования соединений связанного активного кислорода.  | 17                      | 2         |              | 2            | 13                     |                       |
| Тема 3. Ключевая роль соединений связанного активного кислорода в радикально-цепных процессах.   | 17                      | 2         |              | 2            | 13                     |                       |
| Тема 4. Химия радикальных активных форм кислорода в земной атмосфере                             | 15                      | 2         |              | 2            | 11                     |                       |
| Тема 5. Роль активных форм кислорода в химии горения.                                            | 15                      | 2         |              | 2            | 11                     |                       |
| Тема 6. Активные формы кислорода и оксидативная модификация макромолекул: польза, вред и защита. | 13                      | 2         |              |              | 11                     |                       |
| Тема 7. Медицинская химия соединений связанного активного кислорода.                             | 13                      |           |              | 2            | 11                     |                       |
| <b>Итого по содержательному модулю 1</b>                                                         | <b>108</b>              | <b>12</b> | <b>-</b>     | <b>12</b>    | <b>84</b>              |                       |

## 5. Методические рекомендации для проведения лекционных, практических и лабораторных занятий.

Практические занятия не предусмотрены учебным планом.

### ТЕМЫ ЛЕКЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ

| <i>№<br/>п/п</i> | <i>Название темы</i>                                                                     | <i>Количество<br/>часов</i> |
|------------------|------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|
| 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                           |
| <b>ВСЕГО</b>     |                                                                                          | <b>12</b>                   |

### ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

| <i>№<br/>п/п</i> | <i>Название темы</i>                                                                  | <i>Количество<br/>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. Противомалярийная активность производных артемизинина | 2                           |
| 6.               | QSAR пероксидных АФК. Антибактериальная активность пероксидных АФК.                   | 2                           |
| <b>ВСЕГО</b>     |                                                                                       | <b>12</b>                   |

## 6. Методические рекомендации по организации самостоятельной работы студентов.

### ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

| <i>№<br/>п/п</i> | <i>Название темы</i>                                                                    | <i>Количество<br/>часов</i> |
|------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|
| 1.               | Молекулярный кислород и его активные формы.                                             | 7                           |
|                  | Индивидуальная работа (п. 1)                                                            | 7                           |
| 2.               | Молекулярная структура и реакции образования соединений связанного активного кислорода. | 7                           |
|                  | Индивидуальная работа (п. 2)                                                            | 6                           |

|              |                                                                                                |           |
|--------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 3.           | Ключевая роль соединений связанного активного кислорода в радикально-цепных процессах.         | 7         |
|              | Индивидуальная работа (п. 3)                                                                   | 6         |
| 4.           | Химия радикальных активных форм кислорода в земной атмосфере                                   | 6         |
|              | Индивидуальная работа (п. 4)                                                                   | 5         |
| 5.           | Роль активных форм кислорода в химии горения.                                                  | 6         |
|              | Индивидуальная работа (п. 9)                                                                   | 5         |
| 6.           | <i>Активные формы кислорода и оксидативная модификация макромолекул: польза, вред и защита</i> | 4         |
|              | Индивидуальная работа (п. 7)                                                                   | 4         |
|              | Индивидуальная работа (п. 8)                                                                   | 3         |
| 7.           | <i>Медицинская химия соединений связанного активного кислорода.</i>                            | 4         |
|              | Индивидуальная работа (п. 5)                                                                   | 4         |
|              | Индивидуальная работа (п. 6)                                                                   | 3         |
| <b>ВСЕГО</b> |                                                                                                | <b>84</b> |

## 7. Индивидуальные задания содержатся в методических указаниях.

### Индивидуальная работа

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

1 В приближении АМ1, RM1 и РМ3 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 АМ1, RM1 и РМ3 полуэмпирической квантовой химии. Провести сравнительный анализ энергетического расположения МО и распределения электронов в триплетном и синглетном электронном состояниях. 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 Hyper Chem 8). Освоить методику расчета колебательного спектра химических соединений (использовать комплекс программ структурной химии Hyper Chem 8). Освоить методику расчета QSAR параметров химических соединений (использовать комплекс программ структурной химии Hyper 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 ( $\text{RO}^\bullet$ ), 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**

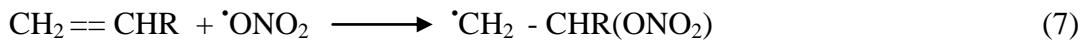
| AM1 метод |                                      |                 | RM1 метод |                                      |                 |
|-----------|--------------------------------------|-----------------|-----------|--------------------------------------|-----------------|
| вариант   | R <sub>1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

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 РМ3 квантовохимический расчет реагентов и продуктов реакций 3-5 в режиме оптимизации молекулярной геометрии при 298 С. Рассчитать ΔE реакций (1-7) при 0 К. Рассчитать ΔE реакций (1-7) при 298 К. Рассчитать ΔH реакций (1-7) при 298 К. Рассчитать ΔG реакций (1-7) при 298 К



С олефином реализуется и реакция присоединения.



Спирты, эфиры, органические кислоты и другие соединения образуют соответствующие углеродцентрированные радикалы >C-OH. В воздухе с низким содержанием углеводородов в основном присутствуют гидроксильные (HO<sup>·</sup>) и гидропероксильные (HO<sub>2</sub><sup>·</sup>) радикалы, которые, реагируя с углеводородами RH и O<sub>2</sub>, быстро могут превращаться в пероксирадикалы RO<sub>2</sub><sup>·</sup>.

5. Обосновать бактероцидный эффект соединений связанного активного кислорода.
6. Обосновать биохимическое действие артемизина на малерийный плазмоид.
7. Обосновать схемы образования и распада соединений связанного активного кислорода.
8. Обосновать схему образования активных форм кислорода и оксидативной модификации молекул.
9. Предложить и обосновать схему процесса горения.

## **8. Контрольные вопросы к промежуточной аттестации**

1. Активные формы кислорода.
2. Структура и физико-химические свойства синглетного молекулярного кислорода.
3. Химические свойства синглетного кислорода.
4. Химические соединения связанного активного кислорода.
5. Электронная структура и функции соединений содержащих связанный активный кислород.
6. О-центрированные радикалы.
7. Ключевая роль пероксидов в радикально-цепных процессах окисления и полимеризации.
8. Структурирование и вулканизация полимеров с помощью пероксидов.
9. Пероксидный способ получения фенола и ацетона из кумола.
10. Пероксиды как окислительные реагенты: эпоксидирование олефинов. гидропероксидами (халкон-процесс); эпоксидирование олефинов пероксикилотами.
11. Химический состав атмосферы; фотохимический смог; источники метана и оксидов азота в атмосфере.
12. Образование и распад пероксидных соединений в атмосфере.
13. Процессы образования пероксинитратов при смоговых ситуациях, их роль в химии атмосферы.
14. Механизм реакции горения и окисления органических соединений.
15. Химия действия пероксидных промоторов к топливу для авиационной и ракетно-космической техники.
16. Химия действия пероксидного топлива для ракетно-космической техники.
17. Пероксидная модификация биомолекул и ее биологические последствия.
18. Оксидативный стресс и его последствия.
19. Пероксидное окисление липидов.
20. Образование и распад пероксидных соединений в процессе оксидативной модификации ДНК.

## **9. Образец модульного контроля**

### **ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»** Химический факультет

|                                                        |                                                           |
|--------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------|
| <i>Направление подготовки: Магистерская программа:</i> | 04.04.01 Химия химическое образование                     |
| <i>Программа подготовки: по</i>                        | <i>академическая магистратура</i>                         |
| <i>Семестр</i>                                         | 1                                                         |
| <i>Учебная дисциплина</i>                              | Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода |

### **МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА**

#### **ВАРИАНТ № 1**

##### **Задание 1.**

1. Структура и физико-химические свойства синглетного молекулярного кислорода.
2. Химические свойства синглетного кислорода.
3. Химические соединения связанного активного кислорода.
4. Ключевая роль пероксидов в радикально-цепных процессах окисления и полимеризации.

5. Процессы образования пероксинитратов при смоговых ситуациях, их роль в химии атмосферы.

### ПРАКТИКО-ОРИЕНТИРОВАННЫЕ ЗАДАНИЯ

(каждое задание оценивается 5 баллами)

**Задание 2.** Описать методологию определения прочности О-О связи ( $BDE_{O-O}$ ) в молекуле  $H_2O_2$ . Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.

**Задание 3.** Описать методологию определения орбитального потенциала ионизации в соответствии теоремы Купманса синглетного и триплетного молекулярного кислорода  $a$ . Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.

**Задание 4.** Описать методологию определения энергии дезактивации синглетного возбужденного электронного состояния ( $S_1$ ) молекулы  $H_2O_2$  путем флуорисценции ( $S_1 \rightarrow S_0$ ). Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.

Утверждено на заседании кафедры физической химии,  
протокол № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 20 \_\_.г.

Зав. кафедрой физической химии \_\_\_\_\_

Преподаватель \_\_\_\_\_

### Критерии оценивания модульного контроля

| Номер задания | Количество баллов |
|---------------|-------------------|
| Задание 1     | 5                 |
| Задание 1     | 5                 |
| Задание 3     | 5                 |
| Задание 4     | 5                 |
| <b>Всего</b>  | <b>20</b>         |

### 10. Образец экзаменационного билета

#### *Теоретические вопросы к экзамену*

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 НОООН 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 оксидомами 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 СО 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 ( $\cdot\text{ONO}_2$ ) 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 инициированной 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 процессе инициированной 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.

*Образец экзаменационного билета*

**ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**  
Химический факультет

*Направление подготовки:* **44.04.01 Химия**  
*Магистерская программа:* **химическое образование**  
*Программа подготовки:* **академическая магистратура**  
*Семестр* **1**  
*Учебная дисциплина* **Физико-химия процессов с участием активных форм кислорода**

**БИЛЕТ №1**

1. Механизм Рассела пероксидного окисления липидов.
2. Пероксидная модификация ДНК при участии синглетного кислорода.
3. Химизм процесса пероксидной модификации молекул протеина инициированной гидроксильными радикалами.
4. Пероксидный стресс. Метаболизм этанола в печени.
5. Фотохимические процессы в атмосфере с участием озона и АФК.

Утверждено на заседании кафедры физической химии  
Протокол №\_\_\_\_ от „\_\_\_\_” 20\_\_\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

**Критерии оценивания экзамена**

| <b>Номер задания</b> | <b>Количество баллов</b> |
|----------------------|--------------------------|
| Задание 1            | 10                       |
| Задание 2            | 10                       |
| Задание 3            | 10                       |
| Задание 4            | 10                       |
| Задание 5            | 10                       |
| <b>Всего</b>         | <b>50 баллов</b>         |

**11. Образец тестового задания**

**12. Критерии оценивания**

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

*Распределение баллов, которые могут получить студенты  
в процессе изучения дисциплины*

| <b>Организационно<br/>учебная работа<br/>студента</b> | <b>СРС</b>                       |                               |                                                |
|-------------------------------------------------------|----------------------------------|-------------------------------|------------------------------------------------|
|                                                       | <b>Индивидуальная<br/>работа</b> | <b>Модульный<br/>контроль</b> | <b>Индивидуальная<br/>творческая работа</b>    |
| max 30 баллов                                         | max 30 баллов                    | max 40<br>баллов              | max 30 баллов                                  |
|                                                       |                                  |                               | разработка реферата,<br>подготовка доклада СРС |

**Шкала соответствия баллов национальной шкале**

| <b>Оценка по шкале ECTS</b> | <b>Оценка по 100-балльной шкале</b> | <b>Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)</b>                                       | <b>Оценка по государственной шкале (зачет)</b> |
|-----------------------------|-------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|
| <b>A</b>                    | 90-100                              | 5 (отлично)                                                                                                      | зачтено                                        |
| <b>B</b>                    | 80-89                               | 4 (хорошо)                                                                                                       | зачтено                                        |
| <b>C</b>                    | 75-79                               | 4 (хорошо)                                                                                                       | зачтено                                        |
| <b>D</b>                    | 70-74                               | 3 (удовлетворительно)                                                                                            | зачтено                                        |
| <b>E</b>                    | 60-69                               | 3 (удовлетворительно)                                                                                            | зачтено                                        |
| <b>FX</b>                   | 35-59                               | 2 (неудовлетворительно)<br>с возможностью повторной сдачи                                                        | не зачтено                                     |
| <b>F</b>                    | 0-34                                | 2 (неудовлетворительно)<br>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. Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета.

**14. Рекомендованная литература**

| № | <b>Литература</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | Кол-во экз.        |
|---|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|
|   | <b>Основная</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                    |
| 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.<br><a href="http://library.donnu.ru/catalog/">http://library.donnu.ru/catalog/</a>                                                                                                                 | Электронный ресурс |
|   | <b>Дополнительная</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                    |
| 1 | Supramolecular reaction of lauroylperoxidewithtetraalkylammoniumBromides/N.A. Turovskij at. al. // Oxidation Communications. – 2010. – Vol. 33, № 3. – P. 485-501.<br><a href="http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4318">http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4318</a>                                                                                                           | Электронный ресурс |
| 2 | Molecular Design and Reactivity of the 1-Hydroxycycloheyl Hydroperoxide – Alk <sub>4</sub> NBr Complexes / N.A. Turovskij at. al. // Handbook of Chemistry, Biochemistry and Biology: New Frontiers / ed.: Shishkina L.N. et al. – New York, 2010. – Chap. 21. – P. 225-233.<br><a href="http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4319">http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4319</a> | Электронный ресурс |
| 3 | 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.<br><a href="http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4320">http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4320</a>                        | Электронный ресурс |
| 4 | Кузнецова А.А. Окисление ДНК и ее компонентов активными                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Электронный        |

|   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                    |
|---|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|
|   | формами кислорода [Текст] / А.А. Кузнецова, Д.Г. Кнорре, О.С. Федорова // Успехи химии. – 2009. – Т. 78, № 7. – С. 714-734.                                                                                                                                                                                        | ресурс             |
| 5 | <u>Денисов</u> Е.Т. 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 |
| 6 | КолупаевЮ. Е. Активные формы кислорода и стрессовый сигналинг у растений [Текст] / Ю. Е. Колупаев, Ю. В. Карпец // <u>Ukrainian biochemical journal</u> . – 2014. – Vol. 86, № 4. – С. 18-35. Режим доступа: <a href="http://nbuv.gov.ua/UJRN/BioChem_2014_86_4_4">http://nbuv.gov.ua/UJRN/BioChem_2014_86_4_4</a> | Электронный ресурс |
| 7 | Логинова А.Ю. Роль активных форм кислорода в процессах самоочищения природных водных экосистем [Текст] / А.Ю. Логинова, Н.А. Силаева// <u>Журнал актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук</u> . – 2015. – № 4-1. – С. 48-51.                                                                           | Электронный ресурс |

## 15. Информационные ресурсы

<http://mondnriyu/> – Министерство образования и науки Донецкой Народной Республики

<http://resobrnadzor.ru/> – Республиканская служба по контролю и надзору в сфере образования и науки

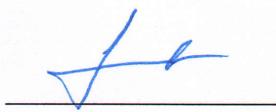
## 16. Программное обеспечение.

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46484614);
2. Microsoft Office ((корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46472919);
3. МОРАС 2016 – комплекс программ структурной химии (программа доступа бесплатно для академического, некоммерческого использования. Академическая лицензия).
4. Microsoft Visual Studio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
5. 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 2018/2019 год.

Протокол № 1 от “20” августа 2018 г.

Зав. кафедрой



Михальчук В.М.