


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А.Маракаев

« 24 » мая 2022 г.

Рабочая программа дисциплины
«Свободные радикалы в химии и биологии:
строение, реакционная способность и методы исследования»

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль)

«Физико-органическая и фармацевтическая химия»

Форма обучения

очная

Программа одобрена
на заседании института
от 14 апреля 2022 г., протокол № 8

Программа одобрена НМК
факультета биологии и экологии
протокол № 8 от 18 апреля 2022 г.

Ярославль

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование у обучающихся представлений о строении и свойствах свободных радикалов, методах исследования химических процессов с их участием, а также роли гомолитических процессов, в частности, перекисного окисления, в жизнедеятельности организма.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока 1, является дисциплиной по выбору (Б1.В.ДВ.02.01). По содержанию и методически дисциплина связана с дисциплинами «Термодинамика и кинетика химических и биохимических процессов», «Компьютерное моделирование химических и биохимических процессов» и «Методы аналитических исследований».

Требования к входящим знаниям:

- знание основ физической химии, кинетики химических процессов;
- владение современными физико-химическими методами исследования.

Знания, полученные при изучении дисциплины, используются при подготовке магистерской диссертации и в дальнейшей научно-исследовательской работе.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ОП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
Профессиональные компетенции		
ПК-5-н Способен выдвигать концепции направленной структурной модификации соединения-лидера в зависимости от наличия информации о его молекулярной мишени действия в организме.	ПК-5-н.3 Применяет методы математической химии (компьютерное молекулярное моделирование и QSAR) для решения задач, связанных с прогнозированием возможности взаимодействия химических соединений с биологической мишенью.	Знать: – механизмы химических и биохимических процессов с участием свободных радикалов. Уметь: – проводить кинетический анализ процессов окисления липидов в присутствии антиоксидантов. Владеть: – навыками проведения кинетического компьютерного моделирования радикальных биохимических процессов и анализа его результатов.
ПК-7-н Способен использовать теоретические представления химии для анализа механизмов химических реакций и реакционной способности органических соединений.	ПК-7-н.1 Выбирает методы исследования закономерностей и механизмов химических процессов, интерпретирует и анализирует полученные результаты.	Знать: – основные методы исследования свободных радикалов. Уметь: – анализировать литературные данные с целью подбора оптимальных методов исследования свободных радикалов; – применять стабильные радикалы для исследования кинетики и механизма цепных процессов.

		Владеть: – кинетическими приемами и методами исследования элементарных реакций свободных радикалов; – навыками использования косвенных методов определения свободных радикалов.
	ПК-7-н.2 Проводит анализ связи строения с реакционной способностью органических соединений, выявляет корреляции «структура – реакционная способность».	Знать: – взаимосвязь структуры и свойств свободных радикалов. Уметь: – проводить кинетический анализ химических процессов с участием свободных радикалов; – проводить корреляционный анализ реакционной способности радикалов и антиоксидантов. Владеть навыками: – анализа реакционной способности свободных радикалов.

4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 акад. ч.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам) Формы ЭО и ДОТ (при наличии)
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Строение и свойства свободных радикалов.	2	4	6				25	Решение задач
2	Реакции генерирования свободных радикалов.	2	2	4				15	Решение задач
3	Стабильные радикалы.	2	4	4		1		25	Опрос
4	Методы исследования свободных радикалов.	2	4	6				30	Опрос, контрольная работа
5	Свободные радикалы в жизнедеятельности организма. Окислительный стресс.	2	4	6		1		30	Опрос, защита реферата
							0,3	8,7	Зачет
	ИТОГО		18	26		2	0,3	133,7	

4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Место проведения занятий в форме практической подготовки
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Строение и свойства свободных радикалов.	2		6					Факультет биологии и экологии ЯрГУ
2	Реакции генерирования свободных радикалов.	2		4					Факультет биологии и экологии ЯрГУ
3	Стабильные радикалы.	2		4					Факультет биологии и экологии ЯрГУ
4	Методы исследования свободных радикалов.	2		6					Факультет биологии и экологии ЯрГУ
5	Свободные радикалы в жизнедеятельности организма. Окислительный стресс	2		6					Факультет биологии и экологии ЯрГУ
	ИТОГО			26					

Содержание разделов дисциплины

1. Строение и свойства свободных радикалов

- 1.1. Введение. Открытие свободных радикалов.
- 1.2. Пространственная структура радикалов. Энергии диссоциации связей и энтальпии образования радикалов. Магнитные свойства свободных радикалов.
- 1.3. Специфика жидкофазных радикальных реакций. Диффузионно-контролируемые реакции. Рекомбинация и диспропорционирование радикалов.
- 1.4. Мономолекулярные реакции свободных радикалов (изомеризация, распад).
- 1.5. Реакции радикального отрыва. Реакции замещения. Реакции бирадикалов. Реакции радикального присоединения.
- 1.6. Линейные корреляции в радикальной химии. Параболическая модель бимолекулярной радикальной реакции. Триплетное отталкивание. Стерический и полярный фактор. Мультидипольное взаимодействие.

2. Реакции генерирования свободных радикалов

- 2.1. Инициаторы свободно-радикальных реакций. Механизмы распада инициаторов. Клеточный эффект.
- 2.2. Влияние внешних условий на мономолекулярный распад инициаторов. Кинетика распада. Цепной распад инициаторов.
- 2.3. Бимолекулярные реакции генерирования радикалов. Реакции углеводородов с озоном, диоксидом азота, молекулярным хлором. Генерирование радикалов при автоокислении углеводородов.

2.4. Окислительно-восстановительные реакции генерирования радикалов. Распад пероксида водорода и гидропероксидов на радикалы под действием ионов металлов переменной валентности. Реакции ионов переменной валентности с окисляемым соединением.

2.5. Фотохимическое разложение молекул. Фотосенсибилизация. Радиационно-химическое инициирование. Генерирование атомов и радикалов электроразрядом.

3. Стабильные радикалы

3.1. Понятие стабильных радикалов. Открытие стабильных радикалов.

3.2. Основные классы стабильных радикалов. Углеводородные, феноксильные, нитроксильные радикалы.

3.3. Реакционная способность стабильных радикалов. Парамагнитный катализ цис-транс-изомеризации стабильными радикалами. Присоединение стабильных радикалов к двойной связи. Реакции замещения с участием стабильных радикалов.

3.4. Свойства нитроксильных радикалов. Кислотно-основные, химические свойства нитроксильных радикалов. Окислительно-восстановительные процессы в триаде гидроксилмин – нитроксильный радикал – оксоаммониевый катион. Биологическая активность: супероксиддисмутазная и противоопухолевая активность.

3.5. Применение нитроксильных радикалов. Нитроксильные радикалы как ингибиторы процессов полимеризации и окисления. Механизмы регенерации нитроксильных радикалов. Методы спиновых меток, спиновых зондов и спиновых ловушек. Практическое применение нитроксильных радикалов: усилители контраста в МРТ, источники тока, применение в органическом синтезе. Живая полимеризация.

4. Методы исследования свободных радикалов

4.1. Исследование структуры и свойств свободных радикалов методом спектроскопии ЭПР. Параметры спектров ЭПР. Форма и ширина линий спектров ЭПР. Сверхтонкое взаимодействие. Спиновая плотность в радикалах. Обнаружение свободных радикалов методом спиновых ловушек.

4.2. Спектроскопия ЯМР как метод исследования свободных радикалов. Парамагнитные сдвиги в спектрах ЯМР и ядерная релаксация в радикалах и их комплексах. ЯМР в стабильных радикалах. ЯМР в парамагнитных комплексах радикалов.

4.3. Прочие методы исследования свободных радикалов. Хемилюминесценция как метод исследования кинетики реакций пероксидных радикалов. УФ-спектры поглощения свободных радикалов. ИК-спектроскопия свободных радикалов. Масс-спектрометрия свободных радикалов. Потенциалы ионизации свободных радикалов.

4.4. Методы исследования реакций с участием радикалов. Струевые методы. Постоянная, ускоренная и остановленная струи. Применение струевых методов. Импульсный фотолиз и импульсный радиолиз.

5. Свободные радикалы в жизнедеятельности организма. Окислительный стресс

5.1. Перекисное окисление липидов и окислительный стресс. Цепной механизм перекисного окисления. Продукты неферментативного окисления ненасыщенных жирных кислот. Роль соединений железа в перекисном окислении липидов.

5.2. Ингибирование перекисного окисления липидов антиоксидантами. Механизм действия фенольных антиоксидантов. Действие антиоксидантов на кинетику перекисного окисления и хемилюминесценцию. Ингибирование неразветвленного и вырожденно-разветвленного перекисного окисления.

5.3. Образование перекисей липидов в биологических системах. Механизм реакций перекисного окисления ненасыщенных жирных кислот в микросомах. Действие перекисей ненасыщенных жирных кислот на биологические мембраны и белки. Перекиси липидов в патологических и физиологических процессах. Роль перекисного окисления липидов в физиологических процессах клетки

5.4. Модельные системы для исследования перекисного окисления липидов. Эфиры ненасыщенных жирных кислот как модели биологических липидов. Окисление в

микрорегетерогенных системах (мицеллах, липосомах) как модель перекисного окисления в липидных мембранах.

5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Вводная лекция – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Студенты знакомятся с назначением и задачами курса, его ролью и местом в системе учебных дисциплин и в системе подготовки в целом. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой учебно-методической литературы.

Академическая лекция (или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя с применением мультимедийных презентаций. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов.

Практическое занятие – занятие, посвященное освоению конкретных умений и навыков и закреплению полученных на лекции знаний.

Консультации – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.

Для организации самостоятельной работы студентов и проведения текущего контроля успеваемости (в форме тестов и заданий) используются **дистанционные технологии** в виде электронного учебного курса (ЭУК) в системе Moodle ЯрГУ. В ЭУК сохраняются оценки, полученные учащимися в процессе изучения курса.

6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

При осуществлении образовательного процесса используются для формирования материалов для текущего контроля успеваемости и проведения промежуточной аттестации, для формирования методических материалов по дисциплине:

- операционные системы семейства Microsoft Windows;
- программы Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome.

7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)

1. NIST Chemical Kinetics Database. <https://kinetics.nist.gov/kinetics/>. База данных содержит информацию о константах скорости и энергиях активации элементарных реакций, протекающих в газовой фазе.

2. NIST Solution Kinetics Database. <https://kinetics.nist.gov/solution/>. База данных содержит информацию о константах скорости и энергиях активации элементарных реакций, протекающих в жидкой фазе.

3. Автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT» http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины

а) основная литература

1. Плисс Е.М. Кинетика гомолитических жидкофазных реакций [Электронный ресурс]: учеб. пособие для студентов, обучающихся по направлению Химия. / Е.М. Плисс, Е.Т. Денисов; Яросл. гос. ун-т им. П.Г. Демидова, Науч.-метод. совет ун-та; Учебно-методическое объединение по классическому университетскому образованию – Ярославль: ЯрГУ, 2015. – 310 с. <http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20150304.pdf>
2. Плисс Е.М. Применение спектральных методов для исследования механизма химических реакций [Электронный ресурс]: метод. указания для студентов, обучающихся по направлению Химия. / Е.М. Плисс, И.В. Тихонов, А.И. Русаков; Яросл. гос. ун-т им. П.Г. Демидова, Науч.-метод. совет ун-та – Ярославль: ЯрГУ, 2013. – 74 с. <http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20130303.pdf>

б) дополнительная литература

1. Физико-химические методы анализа : учебное пособие для вузов / В.Н. Казин [и др.] ; под редакцией Е.М. Плисса. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 201 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-14964-7. – Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. – URL: <https://urait.ru/bcode/485733>

в) ресурсы сети «Интернет»

1. Денисов Е.Т. Радикальные реакции в химии, технологии и живом организме: лекции. <http://lion.icp.ac.ru/e-learn/denisov/>
2. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ (http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php).
3. Научная библиотека ЯрГУ им. П.Г. Демидова (доступ к лицензионным современным библиографическим, реферативным и полнотекстовым профессиональным базам данных и информационным справочным системам: реферативные базы данных Web of Science, Scopus; научная электронная библиотека eLIBRARY.RU; электронно-библиотечные системы Юрайт, Проспект, издательства «ЛАНЬ»; базы данных Polpred.com, «Диссертации РГБ (авторефераты)», ProQuest Dissertations and Theses Global; электронные коллекции Springer; издательство Elsevier на платформе ScienceDirect; журналы Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS), Nature Publishing Group, Американского химического общества Core Package Web Edition (American Chemical Society – ACS) и др.) http://www.lib.uniyar.ac.ru/content/resource/net_res.php
4. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://window.edu.ru/library>).

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения практических занятий (семинаров);
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории (ноутбук и/или персональный компьютер, мультимедиа-проектор, настенный проекционный экран).

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочей программе дисциплины.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока, а в аудитории для практических занятий – списочному составу группы обучающихся.

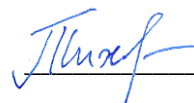
Авторы:

Директор института
фундаментальной и прикладной химии,
д.х.н., профессор



Е.М. Плисс

Доцент института
фундаментальной и прикладной химии, к.х.н.



И.В. Тихонов

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины
«Свободные радикалы в химии и биологии: строение, реакционная
способность и методы исследования»**

**Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости
и промежуточной аттестации студентов по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

Задания для самостоятельной работы

Проверка выполнения осуществляется путем опроса и решения задач у доски в процессе практических занятий.

Задания по теме № 1 «Строение и свойства свободных радикалов»

1. Вычислить энтальпии образования следующих радикалов (в стандартных условиях: 298 К, 1 атм): Me^\bullet , Et^\bullet , $\text{Me}_2\text{C}^\bullet\text{H}$, $\text{Me}_3\text{C}^\bullet$, $\text{PhC}^\bullet\text{H}_2$ и $\text{H}_2\text{C}=\text{C}^\bullet\text{H}$, если $\Delta H(\text{CH}_4) = -74,8$ кДж/моль, $\Delta H(\text{C}_2\text{H}_6) = -84,7$, $\Delta H(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3) = -103,8$, $\Delta H(\text{Me}_3\text{CH}) = -134,5$, $\Delta H(\text{PhCH}_3) = 50,0$, $\Delta H(\text{CH}_2=\text{CH}_2) = 52,3$ и $D(\text{H}-\text{H}) = 436,0$ кДж/моль, а $D(\text{R}-\text{H})$ равны (кДж/моль): 440 (CH_4), 422 (C_2H_6), 412 ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$), 400 (Me_3CH), 375 (PhCH_3), 464 ($\text{CH}_2=\text{CH}_2$).

2. Оценить по аддитивной схеме энтальпию образования каждого из трех пентильных радикалов: $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{C}^\bullet\text{H}_2$; $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}^\bullet\text{HCH}_3$ и $(\text{CH}_3)_2\text{C}^\bullet\text{CH}_2\text{CH}_3$. Энтальпии образования групп (в кДж/моль) равны $\Delta H(\text{C}-(\text{C})(\text{H})_3) = -42,2$, $\Delta H(\text{C}-(\text{C})_2(\text{H})_2) = -20,7$, $\Delta H(\text{C}-(\text{C})_3(\text{H})) = -7,9$, $\Delta H(\text{C}^\bullet-(\text{C})(\text{H})_2) = 160,7$, $\Delta H(\text{C}^\bullet-(\text{C})_2(\text{H})) = 171,5$, $\Delta H(\text{C}^\bullet-(\text{C})_3) = 171,5$.

3. Оценить частоту столкновений молекул CCl_4 в жидком состоянии при 300 К. Амплитуда колебаний молекулы $a = v_f^{1/3}$. Теплота испарения CCl_4 30 кДж/моль. Отношение скорости звука в CCl_4 и газе $u_{\text{ж}}/u_{\text{г}} = 4$.

4. Рекомбинация бензильных радикалов в бензоле при 293 К происходит с константой скорости $2k_t = 8,82 \cdot 10^9$ л/(моль·с). Вязкость растворителя равна 0,65 сп. Какова будет константа скорости рекомбинации этих радикалов в следующих растворителях (293К):

Растворитель	Гексан	Гептан	Октан	Декан	Додекан	Тетралин
Вязкость, сп	0,32	0,41	0,54	0,77	1,26	2,02

5. Термолиз дикумилпероксида (ROOR) проводили при температуре 413 К в серии реагентов (RH) и анализировали количества образовавшихся ацетофенона и метилфенилкарбинола. Получены следующие результаты:

RH	PhCH ₃	PhCH ₂ Me	PhCHMe ₂	Ph ₂ CH ₂	Тетралин
[ROH]/[MeCOPh]	0,681	0,816	0,695	0,550	5,35

Вычислить константы скорости реакций кумилоксильного радикала с наиболее активной С-Н-связью RH, если распад кумилоксильного радикала на ацетофенон и метильный радикал протекает с константой скорости $2,5 \cdot 10^{12} \exp(-46000/RT) \text{ c}^{-1}$.

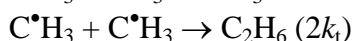
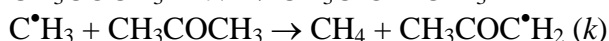
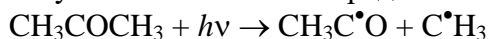
6. Реакция трифторметильных радикалов с олефинами изучалась в растворе изооктана. Радикалы генерировались путем фотолиза гексафторметана. Олефин вводился в концентрации 0,06 моль/л. Концентрация изооктана равна 6 моль/л. Температура опыта 338 К. Измерялось количество образовавшегося трифторметана в отсутствие и в присутствии олефина при стандартном проведении опыта. Ниже приведены результаты эксперимента, $[\text{CF}_3\text{H}]_0$ – концентрация CF_3H , образовавшегося в изооктане в отсутствие олефина, а $[\text{CF}_3\text{H}]$ – его концентрация, образовавшаяся в присутствии олефина,

$\Delta[\text{CF}_3\text{H}] = [\text{CF}_3\text{H}]_0 - [\text{CF}_3\text{H}]$. Получены следующие результаты

Олефин	$\text{CH}_2=\text{CH}_2$	$\text{CH}_2=\text{CHMe}$	$\text{CH}_2=\text{CMe}_2$	$\text{CH}_2=\text{CHCMe}_3$	$\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$
$\Delta[\text{CF}_3\text{H}]/[\text{CF}_3\text{H}]_0$	4,51	6,32	17,2	7,04	2,90

Вычислить на основании этих данных константы скорости реакции CF_3^\bullet радикалов с олефинами, если CF_3^\bullet отрывает атом Н от изооктана с константой скорости $k = 1,04 \cdot 10^6$ л/(моль·с) при 338 К.

7. При фотолизе ацетона в газовой фазе параллельно протекают следующие реакции с участием метильных радикалов:



Как определить константу скорости реакции метильных радикалов с ацетоном, если экспериментально измерены количества метана и этана, образовавшихся в результате фотолиза ацетона, и известна константа скорости рекомбинации метильных радикалов ($2k_i$)?

8. Функция Гаммета для пара-заместителей X и константа скорости реакции RO_2^\bullet с каждым из стерически затрудненных фенолов соответственно равны:

X	H	NO_2	Me_3C	Me	Me_3CO	MeO
$k \cdot 10^{-4}$ л/(моль·с)	1,1	0,16	3,3	3,7	12,0	23,0
σ	0	0,778	-0,197	-0,170	-0,32	0,268

Выполняется ли линейная корреляция Гаммета для этой серии реакций?

9. Вычислить энергии активации реакций $\text{RO}_2^\bullet + \text{R}_i\text{H} \rightarrow \text{ROOH} + \text{R}_i^\bullet$ (RO_2^\bullet – вторичный алкилпероксильный радикал) для следующих алкилароматических углеводородов.

RH	PhCH_3	PhCH_2Me	PhCHMe_2	Ph_2CH_2	Тетралин
$D_{\text{R-H}}$, кДж/моль	375,0	364,1	354,7	356,8	345,6

Параметры, необходимые для расчета, равны: $\alpha = 0,814$, $br_e = 14,74$ (кДж/моль)^{0,5}, $0,5hL(v_i - v_f) = -3,8$ кДж/моль, $D(\text{ROO-H}) = 365,5$ кДж/моль.

10. Оценить вклад энтальпии реакции в энергию активации для реакций класса $\text{H}^\bullet + \text{R}_i\text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{R}_i^\bullet$ при разных ΔH_e . Параметры этого класса реакций: $\alpha = 0,904$, $br_e = 15,12$ (кДж/моль)^{0,5}.

11. Присоединение атома водорода к непредельным соединениям $\text{CH}_2=\text{CHX}$ характеризуется следующими значениями энтальпии и энергии активации (кДж/моль):

$\text{CH}_2=\text{CHX}$	$\text{CH}_2=\text{CH}_2$	$\text{CH}_2=\text{CHMe}$	$\text{CH}_2=\text{CMe}_2$	цикло- C_5H_8	$\text{CH}_2=\text{CHCl}$
$-\Delta H$	154,6	157,8	161,4	150,8	172,0
E	13,9	11,6	9,3	16,5	11,1
ΔE	0,0	-2,3	-4,6	2,6	-2,8
$\Delta\Delta H$	0,0	-3,2	-6,8	3,8	-17,4

Определить коэффициент α' в уравнении Эванса-Семенова для этой группы соединений.

12. Атом водорода присоединяется к этилену с константой скорости $3,85 \cdot 10^8$ л/(моль·с) в газовой фазе при 298 К. Определить параметры br_e и E_e для этой реакции. Необходимые для расчета параметры приведены в таблице. Энтальпия реакции равна минус 154,6 кДж/моль.

Реакция	α	$b \cdot 10^{-11}$, (кДж/моль) ^{0,5} /м	$0,5hLv$, кДж/моль	ΔH_e , кДж/моль	$A \cdot 10^{-10}$, л/(моль·с)

$\text{H}^\bullet + \text{CH}_2=\text{CHR}$	1,440	5,389	9,9	-7,5	10
---	-------	-------	-----	------	----

Задания по теме № 2 «Реакции генерирования свободных радикалов»

1. За расходом распада азоизобутиронитрила следят волнометрически по выделению газообразного азота N_2 . Какому кинетическому закону подчиняется кинетика выделения азота? Как долго следует вести эксперимент при 100°C до полного распада этого инициатора? Каков объем N_2 (при 298 К и 1 атм), который выделится из $[\text{RN}_2\text{R}]_0 = 0,05$ моль/л при объеме раствора, где идет распад, 10 см^3 ?

2. Рассчитать энтальпию реакции озона с наиболее слабой с С–Н-связью следующих углеводородов: толуола ($D_{\text{C-H}} = 375,0$), этилбензола ($D_{\text{C-H}} = 364,1$), кумола ($D_{\text{C-H}} = 354,7$), тетралина ($D_{\text{C-H}} = 349,6$) и трифенилметана ($D_{\text{C-H}} = 346,0$); прочность О–Н-связи в радикале HO_3^\bullet $D_{\text{O-H}} = 350,4$ кДж/моль.

3. Каковы энтальпии реакций $\text{PhCH}_3 + \text{X}_2 \rightarrow \text{PhC}^\bullet\text{H}_2 + \text{HX} + \text{X}^\bullet$ для различных молекул галоидов? В метильной группе толуола $D_{\text{C-H}} = 375$ кДж/моль, $D_{\text{X-X}} = 158,7$ для F_2 , 242,6 для Cl_2 , 192,8 для Br_2 . Прочность связи $D_{\text{F-H}} = 570,3$ кДж/моль, $D_{\text{Cl-H}} = 431,6$ и $D_{\text{Br-H}} = 366,6$ кДж/моль.

4. Рассчитать энтальпию реакций ретродиспропорционирования между стиролом и рядом RH (те же, что в задаче 5), если энтальпии $\Delta H(\text{PhCH}=\text{CH}_2) = 147,4$ кДж/моль и $\Delta H(\text{PhC}^\bullet\text{HCH}_3) = 175,9$ кДж/моль.

5. При распаде азоизобутиронитрила в бензоле при 333К вероятность выхода радикалов в объем из клетки составляет 0,50. Вязкость растворителя равна 0,39 сп. Какова будет вероятность выхода радикалов в объем из клетки при распаде азоизобутиронитрила в следующих растворителях (333К):

Растворитель	Диэтиловый эфир	Гептан	Октан	Додекан	CCl_4
Вязкость, сп	0,17	0,29	0,54	0,72	0,58

Задания по теме № 3 «Стабильные радикалы»

1. Каковы причины устойчивости трифенилметильного радикала? Расположите радикалы в ряд по возрастанию устойчивости: $(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{C}^\bullet$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{C}^\bullet\text{H}_2$, $(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{C}^\bullet\text{H}$, $(\text{C}_6\text{Cl}_5)_3\text{C}^\bullet$.

2. Какие из феноксильных радикалов являются наиболее устойчивыми и почему: пара-метилфеноксил, три-трет-бутилфеноксил, гальвиноксил?

3. Чем обусловлена стабильность алифатических циклических нитроксильных радикалов и ароматических нитроксильных радикалов?

4. Какой из гидразильных радикалов имеет наибольшее применение в химии? Назовите области его применения.

5. Напишите механизм цис-транс-изомеризации под действием стабильных радикалов. Укажите лимитирующую стадию процесса. Как связаны энергия активации с тепловым эффектом комплексообразования?

6. Оцените температуру, при которой реакция присоединения нитроксильных радикалов к двойной связи стирола будет вносить вклад в зарождение цепей.

7. Предложите схему определения прочности ОН-связей в фенолах с использованием их реакции с гальвиноксидом.

8. Какой из нитроксильных радикалов обладает наибольшими основными свойствами? Почему донорные и акцепторные заместители оказывают одинаковое влияние на основность нитроксильных радикалов?

9. Рассмотрите механизм супероксиддисмутазного действия 2,2,6,6-тетраметилпиперидин-1-оксида. Рассчитайте эффективную константу скорости взаимодействия $>\text{NO}^\bullet$ с супероксидом при рН 7 и 5.

10. Какие эндогенные антиоксиданты способны восстанавливать $>\text{NO}^\bullet$ до $>\text{NOH}$?

11. Рассмотрите классический механизм ингибирования нитроксильными

радикалами окисления углеводов. Выведите кинетическое уравнение процесса. Какой порядок имеет данный процесс по субстрату, инициатору, кислороду, $>NO^\bullet$?

12. Рассмотрите механизм ингибированного нитроксильными радикалами окисления стирола. Как можно определить константы скорости взаимодействия $>NO^\bullet$ с R^\bullet и RO_2^\bullet из зависимости скорости окисления от концентрации кислорода?

13. Рассмотрите механизм живой полимеризации. Определите лимитирующую стадию и выведите кинетическое уравнение для данного процесса.

Задания по теме № 4 «Методы исследования свободных радикалов»

1. Назовите условия возникновения электронного парамагнитного резонанса. Какова чувствительность метода ЭПР?

2. В какой форме регистрируется спектр ЭПР? Как определить концентрацию парамагнитных центров в образце?

3. Какие способы активации используются для получения радикалов в резонаторе ЭПР спектрометра?

4. Какие факторы влияют на интенсивность и ширину линий в ЭПР спектрах? При каких температурах записывают спектры ЭПР для получения максимума информации о структуре радикалов?

5. Какие взаимодействия приводят к сверхтонкой структуре ЭПР спектров? Приведите схему образования СТС спектров ЭПР в радикалах: 2,2,6,6-тетраметилпиперидин-1-оксил, $C_2H_5^\bullet$, $CH_3CH^\bullet OH$.

6. Какую информацию несет g-фактор радикала? Какова природа влияния спиновой плотности в радикалах на форму ЭПР спектров?

7. Как влияют заместители в пара-положении на распределение спиновой плотности в феноксильных радикалах? Как проявляются внутримолекулярные движения на ЭПР-спектрах феноксильных радикалов?

8. Какие соединения можно использовать в качестве спиновых ловушек для идентификации структуры короткоживущих радикалов?

9. Какую информацию можно получить из анализа параметров ЯМР спектров радикалов: парамагнитный сдвиг, константы СТВ, магнитная восприимчивость? Какие особенности имеют спектры ЯМР бирадикалов?

10. Какова природа влияния парамагнитных частиц на параметры ЯМР спектров диамагнитных частиц? В чем состоит явление динамической поляризации ядер?

11. Какая из стадий окисления органических соединений молекулярным кислородом сопровождается хемилюминесценцией? Как связана интенсивность хемилюминесценции с концентрацией активных центров?

12. Выведите уравнение, позволяющее определять константу скорости взаимодействия ингибитора с пероксидным радикалом по зависимости интенсивности хемилюминесценции от концентрации ингибитора.

13. Какие полосы поглощения имеются в УФ-спектрах феноксильных и аминильных радикалов? Каким образом можно определить количественное содержание привитых на макромолекулу нитроксильных групп с использованием метода УФ-спектроскопии?

14. Каким образом на основании данных ИК-спектроскопии можно определить пространственную структуру галогенметильных радикалов? Какие типы колебаний проявляются в ИК-спектрах карбонилсодержащих радикалов?

15. Какие процессы происходят при взаимодействии радикалов с электронами? Какие закономерности прослеживаются в изменении потенциалов ионизации в органических радикалах при появлении различных заместителей? В чем состоят сложности при определении абсолютных концентраций радикалов масс-спектрометрическим методом.

16. В чем суть струевых методов? Для исследования каких процессов могут

использоваться струевые методы? В чем различия между методами непрерывной, ускоренной и остановленной струи?

17. Какие источники импульсов света используют в импульсном фотолизе? Назовите области применения импульсной спектроскопии. Назовите преимущества лазерного импульсного фотолиза.

18. Какие элементарные процессы происходят при взаимодействии высокоэнергетических электронов с молекулами? В какие элементарные реакции вступает гидратированный электрон в воде? Для исследования каких радикальных процессов применяют импульсный радиолиз?

Задания по теме № 5 «Свободные радикалы в жизнедеятельности организма. Окислительный стресс»

В качестве самостоятельной работы магистрантам предлагается написать реферат по одной из тем:

1. Перекисная теория старения.
2. Анти- и прооксидантное действие аскорбиновой кислоты в организме.
3. Продукты питания как источники биоантиоксидантов.
4. Флавоноиды как важнейший класс биоантиоксидантов.
5. Антиоксидантное действие витаминов в организме.
6. Методы исследования окисления биологических образцов *in vitro*.
7. Реакция окисления метиллинолеата как модель биологического перекисного окисления.
8. Работы В.П. Скулачева по исследованию возможности отмены «генетической программы старения».
9. Роль процессов перекисного окисления в развитии патологических заболеваний.
10. Антиоксидантное действие цистеина в организме.

Пример варианта контрольной работы

1. Вторичные пероксильные радикалы реагируют со стерически затрудненными фенолами 2,6-СМe₃-4-Х-С₆H₂OH (ArOH) по реакции: RO₂[•] + HOAr → ROOH + ArO[•]. Прочность O–H-связи в феноле и константа скорости, в зависимости от пара-заместителя X при 333 К в углеводородном растворе, соответственно, равны:

X	H	NO ₂	Me ₃ C	Me	Me ₃ CO	MeO
D, кДж/моль	346,4	358,0	339,7	339,0	331,3	327,0
k·10 ⁻⁴ , л/(моль·с)	1,1	0,16	3,3	3,7	12,0	23,0

Определите параметр α в уравнении Поляни-Семенова.

2. По данным иодометрического анализа концентрация дибензоилпероксида в бензоле при 100°C меняется во времени следующим образом:

t, мин	0	3	5	10	20	35	60
[(C ₆ H ₅ CO ₂) ₂]·10 ² , моль/л	2	1,79	1,64	1,36	0,93	0,49	0,19

Определить константу скорости реакции распада дибензоилпероксида.

3. При анализе модифицированного хитозана методом УФ-спектроскопии было обнаружено, что абсорбция образца с массовой концентрацией 0,400 мг/мл на длине волны 250 нм составила 0,894, абсорбция немодифицированного образца составила 0,040. Известно, что средняя молекулярная масса образца олигохитозана составляет 1000 г/моль. Определите среднее число нитроксильных групп, «пришитых» на одну молекулу олигохитозана. Коэффициент экстинкции соответствующего нитроксильного радикала составляет ε₂₅₀ = 2200 М⁻¹·см⁻¹.

4. При ингибированном 2,2,6,6-тетраметилпиперидин-1-оксидом окислении стирола было обнаружено, что период индукции составляет 83 мин при [·NO] = 1·10⁻⁵ моль/л и W_i =

$1 \cdot 10^{-8}$ моль/(л·с). При $[>NO^{\bullet}] = 1 \cdot 10^{-4}$ моль/л скорость ингибированного окисления составляет $1,2 \cdot 10^{-6}$ моль/(л·с) при парциальном давлении кислорода 20 кПа и $2,3 \cdot 10^{-6}$ моль/(л·с) при 100 кПа. Рассчитайте коэффициент ингибирования. Предложите механизм, объясняющий обнаруженные экспериментальные результаты.

Критерии оценивания результатов текущего контроля успеваемости

Форма текущего контроля успеваемости	Правила выставления оценки
Опрос	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос с включением в содержание ответа рассказа (лекции) преподавателя, материалов учебников, дополнительной литературы без наводящих вопросов. - <i>Хорошо</i> выставляется за полный ответ на поставленный вопрос в объеме рассказа (лекции) преподавателя с включением в содержание ответа материалов учебников с четкими положительными ответами на наводящие вопросы преподавателя. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено более половины требуемого материала, с положительным ответом на большую часть наводящих вопросов. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется за ответ, в котором озвучено менее половины требуемого материала или не озвучено главное в содержании вопроса с отрицательными ответами на наводящие вопросы, или обучающийся отказался от ответа без предварительного объяснения уважительных причин.
Решение задач	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется, если задание выполнено полностью. - <i>Хорошо</i> выставляется, если задание выполнено полностью с незначительными ошибками. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся приступил к выполнению задания, наметил алгоритм решения, но допустил серьезные ошибки на этапах решения. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся не приступал к выполнению задания или не смог выработать алгоритм его решения.
Контрольная работа	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Отлично</i> выставляется, если обучающийся выполнил работу (общий процент выполнения заданий не менее 90%), демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме работы, даёт правильный алгоритм решения. - <i>Хорошо</i> выставляется, если обучающийся выполнил работу с небольшими недочетами (общий процент выполнения заданий не менее 70%), демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме работы, допуская незначительные неточности при их применении и выборе алгоритма решения. - <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся в целом выполнил работу (общий процент выполнения заданий не менее 50%), допуская существенные недочеты, в том числе при выборе алгоритма решения. - <i>Неудовлетворительно</i> выставляется, если обучающийся не справился с выполнением задания (общий процент выполнения заданий менее 50%), не смог выбрать алгоритм его решения, продемонстрировав существенные пробелы в знаниях основного учебного материала.

Реферат	<p>- <i>Отлично</i> выставляется, если реферат оформлен с учётом всех требований, подготовлен кратко, научно, логично, в дискуссии по реферату обучающийся может ответить на все вопросы оппонентов.</p> <p>- <i>Хорошо</i> выставляется, если реферат оформлен с учётом всех требований, имеются замечания по подготовке доклада к реферату, в дискуссии по реферату обучающийся ответил на часть вопросов оппонентов.</p> <p>- <i>Удовлетворительно</i> выставляется, если реферат оформлен с замечаниями по требованиям, имеются замечания по подготовке доклада к реферату, в дискуссии по реферату обучающийся не ответил на вопросы оппонентов.</p> <p>- <i>Неудовлетворительно</i> выставляется, если реферат оформлен с замечаниями по требованиям, имеются замечания по подготовке доклада к реферату, либо доклад отсутствует, в дискуссии по реферату обучающийся не ответил на вопросы оппонентов, либо отказался участвовать в дискуссии, реферат отсутствует.</p>
---------	---

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций.

2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов к зачету

1. Пространственная структура радикалов. Магнитные свойства свободных радикалов.
2. Энергии диссоциации связей и энтальпии образования радикалов.
3. Специфика жидкофазных радикальных реакций. Диффузионно-контролируемые реакции.
4. Рекомбинация и диспропорционирование радикалов.
5. Мономолекулярные реакции свободных радикалов (изомеризация, распад).
6. Реакции радикального отрыва. Реакции замещения.
7. Реакции радикального присоединения.
8. Линейные корреляции в радикальной химии. Параболическая модель бимолекулярной радикальной реакции. Триpletное отталкивание. Стерический и полярный фактор. Мультидипольное взаимодействие.
9. Инициаторы свободно-радикальных реакций. Механизмы распада инициаторов. Клеточный эффект.
10. Влияние внешних условий на мономолекулярный распад инициаторов. Кинетика распада. Цепной распад инициаторов.
11. Бимолекулярные реакции генерирования радикалов. Реакции углеводородов с озоном, диоксидом азота, молекулярным хлором. Генерирование радикалов при автоокислении углеводородов.
12. Окислительно-восстановительные реакции генерирования радикалов. Распад пероксида водорода и гидропероксидов на радикалы под действием ионов металлов переменной валентности. Реакции ионов переменной валентности с окисляемым соединением.
13. Фотохимическое разложение молекул. Фотосенсибилизация. Радиационно-химическое инициирование. Генерирование атомов и радикалов электроразрядом.
14. Основные классы стабильных радикалов. Углеводородные, феноксильные, нитроксильные радикалы.
15. Реакционная способность стабильных радикалов. Парамагнитный катализ цис-транс-изомеризации стабильными радикалами.

16. Присоединение стабильных радикалов к двойной связи. Реакции замещения с участием стабильных радикалов.
17. Кислотно-основные, химические свойства нитроксильных радикалов. Окислительно-восстановительные процессы в триаде гидроксилмин – нитроксильный радикал – оксоаммониевый катион. Биологическая активность: супероксиддисмутазная и противоопухолевая активность.
18. Нитроксильные радикалы как ингибиторы процессов полимеризации и окисления. Механизмы регенерации нитроксильных радикалов.
19. Методы спиновых меток, спиновых зондов и спиновых ловушек. Живая полимеризация.
20. Практическое применение нитроксильных радикалов: усилители контраста в МРТ, источники тока, применение в органическом синтезе.
21. Исследование структуры и свойств свободных радикалов методом спектроскопии ЭПР. Параметры спектров ЭПР. Сверхтонкое взаимодействие.
22. Спектроскопия ЯМР как метод исследования свободных радикалов. Парамагнитные сдвиги в спектрах ЯМР и ядерная релаксация в радикалах и их комплексах. ЯМР в стабильных радикалах.
23. Хемилюминесценция как метод исследования кинетики реакций пероксидных радикалов.
24. УФ-спектры поглощения свободных радикалов. ИК-спектроскопия свободных радикалов. Масс-спектрометрия свободных радикалов. Потенциалы ионизации свободных радикалов.
25. Струевые методы. Постоянная, ускоренная и остановленная струи. Применение струевых методов.
26. Импульсный фотолиз и импульсный радиолиз.
27. Перекисное окисление липидов и окислительный стресс. Цепной механизм перекисного окисления.
28. Продукты неферментативного окисления ненасыщенных жирных кислот. Роль соединений железа в перекисном окислении липидов.
29. Ингибирование перекисного окисления липидов антиоксидантами. Механизм действия фенольных антиоксидантов.
30. Образование перекисей липидов в биологических системах. Механизм реакций перекисного окисления ненасыщенных жирных кислот в микросомах. Роль перекисного окисления липидов в физиологических процессах клетки.
31. Эфиры ненасыщенных жирных кислот как модели биологических липидов. Окисление в микрогетерогенных системах (мицеллах, липосомах) как модель перекисного окисления в липидных мембранах.

Правила выставления оценки на зачете:

Устный ответ студента на зачете оценивается по 2-х балльной системе.

Отметка «зачтено» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- студент свободно владеет научной терминологией;
- ответ студента структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов;
- ответ студента логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ студента характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ студента иллюстрируется примерами, в том числе из собственной научно-

исследовательской деятельности;

- студент демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию;
- студент демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

Отметка «незачтено» ставится, если:

- ответ студента обнаружил незнание или непонимание сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые студент не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета студент затрудняется дать ответ или не дает верных ответов;
- студент не демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

**Приложение №2 к рабочей программе дисциплины
«Свободные радикалы в химии и биологии: строение, реакционная
способность и методы исследования»**

Методические указания для студентов по освоению дисциплины

Основной формой изложения учебного материала по дисциплине «Свободные радикалы в химии и биологии: строение, реакционная способность и методы исследования» являются лекции с применением презентаций. Это связано с тем, что изучаемый курс содержит большое количество теоретической информации, рисунков и схем. Лекционный курс предоставляется студенту в электронном виде. Вместе с тем необходимо учитывать, что в ходе лекции многие примеры разбираются и иллюстрируются преподавателем на доске. Без конспектирования данных записей невозможно освоить курс в полном объеме.

Полученные на лекциях теоретические знания закрепляются и применяются на практике на практических занятиях. При решении задач происходит закрепление лекционного материала путем применения его к конкретным задачам дисциплины. Основная цель решения задач – помочь усвоить способы обработки результатов эксперимента. В процессе изучения дисциплины рекомендуется регулярное повторение пройденного лекционного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дома еще раз прорабатывать и при необходимости дополнять информацией, полученной на консультациях, практических занятиях или из учебной литературы. Большое внимание должно быть уделено выполнению домашней работы. В качестве заданий для самостоятельной работы дома студентам предлагаются вопросы, аналогичные разобранным на лекциях или немного более сложные, которые являются результатом объединения нескольких базовых задач. Освоить вопросы, излагаемые в процессе изучения дисциплины самостоятельно студенту крайне сложно, поэтому посещение всех аудиторных занятий является совершенно необходимым.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала и приобретенных практических навыков в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде контрольной работы. Проводятся консультации (при необходимости) по разбору заданий для самостоятельной работы, которые вызвали затруднения. Также для самостоятельной работы студентам предлагается написание реферата с его последующей защитой. В конце семестра студенты сдают зачет, который выставляется по результатам устного собеседования со студентом при условии успешного прохождения всех мероприятий текущей аттестации.

**Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по
дисциплине**

В качестве учебно-методического обеспечения рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе 8 данной рабочей программы.

Также в процессе изучения дисциплины рекомендуется использовать широкий спектр интернет-ресурсов:

1. Денисов Е.Т. Радикальные реакции в химии, технологии и живом организме: лекции (<http://lion.icp.ac.ru/e-learn/denisov/>).

2. Учебные материалы по физической химии электронной библиотеки химического факультета МГУ (<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>). Данный сайт содержит учебные пособия и методические указания, из которых наиболее полезными в рамках данного курса являются:

Еремин В.В., Каргов С.И., Кузьменко Н.Е. Задачи по физической химии. Часть II. Химическая кинетика. Электрохимия
(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/eremin/welcome.html>)

Кубасов А.А. Химическая кинетика и катализ
(<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/kubasov/welcome.html>)

3. Сайты издательств научных журналов и базы данных:

eLibrary.ru — Электронная научная библиотека (<http://elibrary.ru/>)

Портал издательства RSC Publishing (<http://pubs.rsc.org/>)

Портал издательства ACS Publications (<http://pubs.acs.org/>)

Портал Wiley Online Library (<http://onlinelibrary.wiley.com/>)

Портал Sciencedirect (<http://www.sciencedirect.com/>)

Портал издательства Annual Reviews (<http://www.annualreviews.org/>)

Портал SpringerLink (<http://springerlink.com/chemistry-and-materials-science/journals/>)

Портал издательства Taylor & Francis Group (<http://www.informaworld.com/>)

Портал издательства Science (<http://www.sciencemag.org/journals/>)

Портал издательства Nature (<http://www.nature.com/nature/index.html>)

База данных ВИНТИ РАН

(http://www2.viniti.ru/index.php?option=com_content&task=view&id=23&Itemid=100)

База данных NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>)

База данных ChemSpider (<http://chemspider.com>)

4. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://window.edu.ru/library>).

Целью создания информационной системы "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (ИС "Единое окно ") является обеспечение свободного доступа к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.

Полезными для самостоятельной работы являются следующие издания, представленные в библиотеке этого сайта:

1. Преображенский С.А. Определение кинетических параметров радикальной полимеризации: Учебно-методическое пособие. – Воронеж: Изд-во ВГУ, 2005. – 31 с. <http://window.edu.ru/resource/089/27089>

(Пособие, посвященное определению кинетических параметров радикальной полимеризации, подготовлено на кафедре высокомолекулярных соединений и коллоидов химического факультета Воронежского государственного университета. Рекомендовано для студентов химического факультета, изучающих курс "Высокомолекулярные соединения", и студентов, выполняющих дипломную работу на кафедре высокомолекулярных соединений и коллоидов.)

2. Теория горения и взрыва: методические указания к выполнению лабораторных работ / сост.: А.Н. Лопанов, Ю.В. Хомченко. – Белгород: Изд-во БГТУ им. В.Г. Шухова, 2010. – 46 с. <http://window.edu.ru/resource/431/77431>

(Представлены указания к выполнению лабораторных работ по дисциплине "Теория горения и взрыва". В издании рассмотрены методы расчета и моделирования основных процессов горения и взрыва. Методические указания предназначены для студентов специальности 280102 – "Безопасность технологических процессов и производств" заочной формы обучения.)

Для самостоятельного подбора литературы в библиотеке ЯрГУ рекомендуется использовать:

1. Личный кабинет (http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_login.php) дает возможность получения on-line доступа к списку выданной в автоматизированном режиме литературы, просмотра и копирования электронных версий изданий сотрудников университета (учеб. и

метод. пособия, тексты лекций и т.д.) Для работы в «Личном кабинете» необходимо зайти на сайт Научной библиотеки ЯрГУ с любой точки, имеющей доступ в Internet, в пункт меню «Электронный каталог»; пройти процедуру авторизации, выбрав вкладку «Авторизация», и заполнить представленные поля информации.

2. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ

(http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php) содержит более 2500 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете. Доступ в сети университета, либо по логину/паролю.

3. Электронная картотека «Книгообеспеченность»

(http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_bookreq_find.php) раскрывает учебный фонд научной библиотеки ЯрГУ, предоставляет оперативную информацию о состоянии книгообеспеченности дисциплин основной и дополнительной литературой, а также цикла дисциплин и специальностей. Электронная картотека «Книгообеспеченность» доступна в сети университета и через Личный кабинет.