УТВЕРЖДАЮ
Директор ИОС УрО РАН
д.х.н. _____Е.В. Вербицкий
Приказ от 14.03.2022 г. № 25

ОДОБРЕНО:
Ученым советом
ИОС УрО РАН
« 04 » марта 2022 г.
Протокол № 3

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского
Уральского отделения Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплина «ТЕХНОЛОГИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ»

образовательного компонента основной образовательной программы высшего образования - программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре института по научной специальности 2.6.10. Технология органических веществ

Шифр и название области науки *2. Технические науки*

Шифр и название группы научных специальностей *2.6. Химические технологии, науки о материалах, металлургия*

Шифр и название научной специальности *2.6.10. Технология органических веществ*

Отрасли науки, по которым присуждаются ученые степени *Технические Химические*

Форма обучения – Очная

Срок обучения – 4 года

Екатеринбург – 2022

Рабочая программа дисциплины «Технология органических веществ» образовательного компонента основной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре института по научной специальности 2.6.10. Технология органических веществ.

АННОТАЦИЯ ПРОГРАММЫ

Программа предназначена для аспирантов, обучающихся по образовательной программе высшего образования – программе подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре в соответствии с федеральными государственными требованиями.

Рабочая программа:

- соответствует:
  - паспорту научной специальности 2.6.10. Технология органических веществ,
  - базовому плану обучения по программе аспирантуры ИОС УрО РАН по научной специальности 2.6.10. Технология органических веществ;
- подготовлена с учетом тематики научных исследований ИОС УрО РАН.

Дисциплина «Технология органических веществ» относится к дисциплинам (модулям) образовательного компонента программы аспирантуры, является обязательной для освоения и направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по научной специальности.

Освоение дисциплины осуществляется на первом курсе обучения (1 - 2 семестры) со сдачей кандидатского экзамена на третьем курсе (6 семестр) в соответствии с графиком учебного процесса.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е. (144 час.), в том числе:

- аудиторная работа - 1,5 з.е. (54 ч), представлена лекционными занятиями;
- самостоятельная деятельность аспиранта - 2,5 з.е. (90 ч).

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов системы углубленных профессиональных знаний по химической технологии получения в массовом масштабе органических соединений, имеющих товарную ценность, для создания энерго- и ресурсосберегающих, экологически безопасных производств, обладающих высоким качеством продуктов и низкой их себестоимостью.

Задачи дисциплины:

- обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний по органической химии;
- сформировать представление о природе процессов, протекающих в органическом синтезе;
- сформировать представление о термодинамике химических процессов и фазовом равновесии, о кинетике, механизме и катализе органических реакций;
- подготовить аспирантов к применению полученных знаний при выполнении научного компонента программы в части «Научная деятельность»: научно-исследовательская деятельность и подготовка диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

Систематизирование материала по дисциплине происходит в рамках семи разделов:

- Теоретические основы органической химии и механизмы реакций органических соединений;
- Методы получения органических соединений;
- Физико-химические основы процессов органического синтеза;
- Теоретические основы разделительных и реакционно-массообменных процессов в промышленности органического синтеза;
- Химические реакторы для процессов органического синтеза;
- Теория методов исследования вещества в химии;
- Хемоинформатика.

Виды контроля:
- текущий – зачет (2 семестр);
- промежуточный - кандидатский экзамен (6 семестр);
- в рамках представления подготовленной диссертации в виде научного доклада на заседании ученого совета института (8 семестр).

Программа разработана:

Глазыриной Л.Н., зав. отделом аспирантуры ИОС УрО РАН к.т.н., доц.

Филяковой В.И., проф. отдела аспирантуры ИОС УрО РАН д.х.н., проф.

Пестовым А.В., доц. отдела аспирантуры ИОС УрО РАН к.х.н., доц.

Ганебных И.Н., доц. отдела аспирантуры ИОС УрО РАН к.х.н.

Содержание

1. Общая характеристика дисциплины 5

2. Содержание дисциплины 5

Теоретические основы органической химии и механизмы реакций органических соединений

Методы получения органических соединений

Физико-химические основы процессов органического синтеза

Теоретические основы разделительных и реакционно-массообменных процессов в промышленности органического синтеза

Химические реакторы для процессов органического синтеза

Теория методов исследования вещества в химии

Хемоинформатика

3. Фонд оценочных средств для контроля освоения дисциплины 13

4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины 14

5. Материальное обеспечение дисциплины 16

1. Общая характеристика дисциплины

1.1 Цели и задачи изучения дисциплины

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов системы углубленных профессиональных знаний по химической технологии получения в массовом масштабе органических соединений, имеющих товарную ценность, для создания энерго- и ресурсосберегающих, экологически безопасных производств, обладающих высоким качеством продуктов и низкой их себестоимостью.

Задачи дисциплины - обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний по органической химии, о природе процессов, протекающих в органическом синтезе и факторах, влияющих на их протекание, для выполнения аспирантами научного компонента программы аспирантуры.

1.2 Требования к уровню подготовки аспиранта, завершившего изучение данной дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование у аспирантов способности:

- к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;
- к организации и самостоятельному проведению фундаментальных и прикладных научных исследований в области химической технологии с получением научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям в избранной области.

2. Содержание дисциплины

2.1 Виды учебной работы и контроля освоения дисциплины

Виды учебной работы и контроля	**Трудоемкость, час/з.е.**				
	Всего	**По учебным семестрам**			
		1	**2**	**6**	**8**
Аудиторные занятия:	**54/*1.5***	**34/*0.94***	**20/*0.56***		
Лекции	54/*1.5*	34/*0.94*	20/*0.56*		
Практические занятия	-	-	-		
Лабораторные занятия	–	–	-		
Самостоятельная работа студентов	**90/*2.5***	**60/*1.67***	**30/*0.83***		
Вид контроля:	-	-	-		
текущий	-	-	**Зачет**		
промежуточный	-	-	-	**КЭ**	
итоговый	-	–	-		**ИА**
Общая трудоемкость по учебному плану	**144/*4.0***	**94/*2.6***	**50/*1.4***		

2.2 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем учебной нагрузки, час				
		Всего	Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
1	Теоретические основы органической химии и механизмы реакций органических соединений	10	4	0	0	6
2	Методы получения органических соединений	16	6	0	0	10
3	Физико-химические основы процессов органического синтеза	28	8	0	0	20
4	Теоретические основы разделительных и реакционно-массообменных процессов в промышленности органического синтеза	28	8	0	0	20
5	Химические реакторы для процессов органического синтеза	8	4	0	0	4
6	Теория методов исследования вещества в химии	27	12	0	0	15
7	Хемоинформатика	27	12	0	0	15
	Итого(час/з.е.)	**144/4.0**	**54\1.5**	**0**	**0**	**90\2.5**

2.3 Содержание разделов лекционного курса

1. Теоретические основы органической химии и механизмы реакций органических соединений

Определение понятия «механизм реакции». Факторы, от которых зависит осуществление элементарного акта между реагирующими частицами: электронные (возникновение реакционных центров) и пространственные (доступность реакционных центров).

Квантовохимические расчеты реакционной способности. Анализ реакционной способности органических соединений с помощью методов МО.

Классификация реагентов. Нуклеофильные, электрофильные и радикальные реагенты. Их особенности и основные типы.

Классификация реакций. Классификация по химическому характеру (реакции замещения, присоединения, отщепления, молекулярные перегруппировки и по характеру изменения связей).

Реакции замещения. Общая характеристика. Особенности ароматических соединений. Правило Хюккеля. Ароматические карбкатионы и карбанионы. Гетероциклические соединения.

Электрофильное замещение. π- и σ-комплексы. Механизм и кинетика реакций электрофильного замещения. Ориентация при электрофильном замещении. Влияние

заместителей на распределение электронной плотности в основном и переходном состояниях. Относительная константа скорости. Пространственное влияние заместителей.

Нуклеофильное замещение. Особенности нуклеофильного замещения у ненасыщенного и насыщенного атома углерода.Особенности реакций нуклеофильного замещения в ароматических соединениях. Механизм реакций – мономолекулярный, бимолекулярный (присоединение–отщепление), ариновый, ион-радикальный.

Радикальное замещение. Механизм реакции. Влияние различных факторов. Соотношение изомеров. Образование и устойчивость радикалов. Радикальные реакции, протекающие по цепным механизмам.

Реакции присоединения. Общая характеристика. Реакции нуклеофильного, электрофильного и радикального присоединения. Правило Марковникова и эффект Караша.

Реакции отщепления (элиминирования). Общая характеристика. Бимолекулярное и мономолекулярное отщепление.

2. Методы получения органических соединений

Галогенирование.

Прямое галогенирование, основные методы и их сравнительная оценка. Использование галогенводородов, механизм и региоспецифичность реакции. Применение серо- и фосфорорганических галоидных соединений. Замена атома галогена на другие атомы и группы. Замена на гидроксильную группу, циан-группу и другие.

Сульфирование.

Введение сульфогруппы в алифатические и ароматические соединения. Сульфохлорирование. Сульфамиды, их получение и свойства. Сульфаниламидные препараты. Замена сульфогруппы на другие атомы и группы.

Нитрование.

Введение нитрогруппы в алифатические и ароматические соединения. Реагенты, условия проведения реакции. Превращения нитрогруппы. Примеры использования реакции нитрования в синтезе биологически активных соединений.

Нитрозирование.

Реагенты и условия проведения реакции. Применение реакции нит-розирования, синтез пирамидона и анальгина. Нитрозирование по атому азота. Диазометан и диазопарафины.

Диазотирование.

Механизм реакции и условия проведения. Свойства диазосоединений, их анализ. Реакции азосочетания. Использование реакций азосочетания. Превращения диазогруппы. Синтез пиразолонов. Дезаминирование, способ Грисса и новые модификации. Реакция Зандмейера. Замена диазогруппы на другие заместители.

Окисление.

Общие закономерности. Реакции окисления по атому углерода. Окисление метальных и метиленовых групп до первичных и вторичных спиртов, альдегидов и кетонов, карбоновых кислот. Наиболее распространенные реагенты, условия проведения реакций. Реакции окисления и каталитического дегидрирования. Окисление кратных связей углерод-углерод. Реагенты для окисления двойных и тройных связей. Расщепление гликолей. Окислительное расщепление вторичных спиртов и кетонов.

Восстановление.

Типы реакций восстановления. Гидрирование. Катализаторы, их получение и свойства. Гидрогенолиз. Образование новых связей при гидрировании. Реакции восстановления в результате передачи гидрид-иона. Нуклеофильные гидриды. Комплексные гидриды. Примеры восстановления. Восстановление с помощью металлоорганических соединений. Реактивы Гриньяра. Восстановление под действием металлов (*Na, Mg, Zn*). Условия проведения реакций, механизм, стереохимия.

Окислительно-восстановительные реакции. Реакции Оппенауэра-Меервейна-Пондорфа. Условия проведения и механизм. Реакция Канниццаро-Тищенко.

Реакции элементоорганических соединений.

Классификация ЭОС. Методы синтеза и свойства. Особенности магний-, цинк-, кадмий-, алюминий-, литийорганических соединений. Использование ЭОС в тонком органическом синтезе. Способы получения ртуть-, мышьяк- и фосфорорганических соединений. Их применение в химии биологически активных соединений. Соединения бора. Способы получения и реакции.

Ацилирование.

Реакция Фриделя-Крафтса, условия проведения. Примеры использования в химии биологически активных соединений. Формилирование ароматических соединений. Реакция Вильсмейера. Условия проведения, реагенты.

Фосфорилирование.

Реакции фосфорилирования при создании моно- , ди- и триэфиров ортофосфорной кислоты. Механизм образования. Возможные побочные реакции. Стратегия синтеза. Методы активации фосфорной кислоты. Хлорфосфатный метод, использование смешанных ангидридов фосфорных кислот, дициклогексилкарбодиимидный метод, реакции с использованием фосфатинов. Достоинства и ограничения методов.

Использование защитных групп в тонком органическом синтезе и химии биологически активных соединений. Защиты *C–H* связей в ацетиленовых и ароматических соединениях. Защита *N–H* связей. Образование новой *N–C* связи. Производные уретанового синтеза. Алкильные и арильные производные. Силильные защиты. Защиты гидроксильной группы. Защиты карбоксильной группы. Способы получения различных эфиров, их устойчивость и методы деблокирования. Защита тиолов путем введения защитных групп за счет модификации сульфгидрильного заместителя. Методы защиты альдегидов и кетонов. Защита кратных углерод-углеродных связей.

Реакции конденсации.

Типы реакций. Взаимодействие карбонильных соединений с *C–H*-кислотами. Получение аминокислот по Штреккеру Альдольно-кротоновая конденсация. Условия проведения. Реакции Кневенагеля, Перкина и др. Синтез глицидных эфиров по Дарзану. Сложноэфирная Кляйзеновская конденсация. Реакция Михаэля, использование в химии природных соединений. Реакция Манниха. Реакция Виттига, реагенты, условия проведения, регио- и стереоспецифичность. Реакция Дильса-Альдера. Конденсация Дэкина-Веста, Арндта-Эйстерта. Реакция Кнорра. Конденсация Бишлера-Напиральского.

Перегруппировки.

Классификация перегруппировок. Реакции, протекающие при образовании заряда, не сопряженного с кратными связями. Миграция углеродного остатка от атома углерода к другому атому углерода.

Нуклеофильные и электрофильные перегруппировки.

Образование положительного заряда на атоме углерода за счет поляризации двойной связи, отщепления галогена, гидорксила, диазогруппы. Положительный заряд на атоме азота, способы образования. Перегруппировки при образовании заряда на кислороде. Перегруппировки аллильного типа. Радикальные, нуклеофильные и электрофильные перегруппировки. Перенос остатка с углерод на углерод, с гетероатома на углерод.

Использование новых реагентов в тонком органическом синтезе.

Реагенты на полимерных носителях, их применение и преимущества. Межфазный катализ с использованием гетерофазных реагентов. Краун-эфиры. Примеры использования новых реагентов в химии природных соединений.

3. Физико-химические основы процессов органического синтеза

Основы термодинамики химических процессов и фазовых равновесий.

Термодинамические закономерности химических и фазовых равновесий для реальных многокомпонентных систем. Характеристические функции, химические потенциалы. Понятие активности и коэффициентов активности, методы их расчета и экспериментального определения для реальных газов и жидкостей (растворов). Принципы расчета фазовых и

химических равновесий для реальных многокомпонентных систем и сложных реакций. Закон действия масс. Стехиометрический анализ сложных реакций. Степень завершенности реакции.

Термодинамический анализ важнейших реакций органического синтеза (хлорирования, окисления, гидрирования и дегидрирования, гидратации и дегидратации, этерификации и гидролиза, карбонилирования и алкилирования и др.) и выбор условий их проведения.

Математическое моделирование фазовых равновесий жидкость-пар, жидкость-жидкость, жидкость-жидкость-пар, жидкость-твердое тело. Явление азеотропии, хемиазеотропии и полиазеотропии. Предельные законы фазового равновесия (законы Рауля и Дальтона). Анализ статики многофазных реакционных систем с избирательным обменом с внешней средой. Основные понятия термодинамико-топологического анализа структура диаграмм фазового равновесия.

Кинетика, механизм и катализ органических реакций.

Активные частицы (промежуточные соединения) в органическом синтезе. Ионы, радикалы, карбены, ион-радикалы, комплексы металлов, металлоорганические соединения. Основы теории реакционной способности органических соединений. Связь кинетики с термодинамикой. Принцип Белла-Эванса-Поляни. Уравнения Бренстеда, Гаммета, Тафта, Поляни-Семенова. Правила отбора элементарных стадий при выдвижении гипотез о механизме реакций.

Гетеролитические и гомолитические механизмы. Нуклеофильные и электрофильные реакции замещения, присоединения и отщепления в органическом синтезе. Кинетика и механизм этих реакций. Влияние среды. Кислотный и основной катализ в гетеролитических реакциях. Протонные и апротонные кислоты. Промышленные катализаторы. Механизм реакций и особенности кинетики процессов гидратации, дегидратации, алкилирования, полимеризации, гидролиза, этерификации, крекинга.

Радикально-цепные процессы в промышленном органическом синтезе. Механизм, инициаторы, катализаторы, ингибиторы. Кинетические модели реакций хлорирования, окисления, пиролиза и полимеризации.

Металлокомплексный катализ в промышленном органическом синтезе. Строение комплексов металлов. Природа и механизм основных стадий каталитических реакций с участием металлокомплексов. Особенности кинетики реакций в случае металлокомплексного катализа. Катализаторы и механизм реакции карбонилирования метанола, процесса оксосинтеза, процессов окисления олефинов кислородом и гидропероксидами, процессов гидрирования и полимеризации, метатезиса олефинов.

Гетерогенный катализ в промышленном органическом синтезе. Катализ металлами, оксидами и полифункциональными, катализаторами. Механизм реакций гидрирования, окисления, окислительного аммонолиза, синтезов из CO и H_2. Влияние процессов массообмена на кинетику гетерогенно-каталитических реакций. Кинетика в условиях кинетической, внешне- и внутреннедиффузионных областей. Гетерофазные процессы. Особенности кинетики в случае медленных и мгновенных химических реакций с учетом влияния диффузии.

Теоретические основы построения кинетических моделей сложных многомаршрутных реакций органического синтеза. Теория маршрутов. Методы анализа кинетических данных и математического описания состава продуктов и селективности для сложных реакций: последовательных, параллельных, последовательно-параллельных.

4. Теоретические основы разделительных и реакционно-массообменных процессов в промышленности органического синтеза

Нуклеофильное замещение в алифатическом ряду. Механизмы SN1 и SN2, смешанный ионно-парный механизм. Влияние структуры субстрата и полярности растворителя на скорости и механизм реакции. Анхимерное содействие и синартетическое

ускорение, уча-стие соседних групп, перегруппировки в ходе нуклеофильного замещения. Корреляцион-ные уравнения Суэйна—Скотта и Эдвардса.

Нуклеофильное замещение при кратной углерод-углеродной связи и в ароматическом ядре. Типичные механизмы нуклеофильного замещения у sp2-гибридного атома углерода. Винильный катион. Моно- и бимолекулярные процессы нуклеофильного замещения в ароматическом ряду. Катализ переходными металлами. Нуклеофильное замещение в нитропроизводных бензола. Нуклеофильное замещение водорода (викариозное замещение). Комплексы Мейзенхеймера. Нуклеофильное замещение в ароматических гетероцик-лах. Кине-замещение.

Электрофильное замещение у атома углерода. Механизмы замещения SE1, SE2, SEi. Нуклеофильный катализ электрофильного замещения. Влияние структуры субстрата и эффектов среды на скорость и направление реакций. Замещение у олефинового атома углерода и в ароматическом кольце. Генерирование электрофильных реагентов. Правила ориентации и их молекулярно-орбитальная интерпретация. Электрофильное замещение других групп, кроме водорода. Ипсо-замещение. Кинетические изотопные эффекты.

Реакции элиминирования (отщепления). Механизмы гетеролитического элиминирования E1 и E2. Стереоэлектронные требования и стереоспецифичность при E2-элиминировании. Термическое син-элиминирование.

Присоединение по кратным углерод-углеродным связям. Электрофильное присоединение. Сильные и слабые электрофилы, механизм и стереохимия присоединения, регио- и стереоселективность реакций. Присоединение к сопряженным системам. Катионная полимеризация олефинов. Нуклеофильное присоединение по кратным связям С-С. Механизм процесса. Влияние структуры нуклеофила и субстрата и эффектов среды на скорость и направление реакции. Реакция Михаэля. Анионная полимеризация олефинов.

Нуклеофильное присоединение к карбонильной группе: присоединение оснований, включая карбанионы, металлорганических соединений. Реакция Анри. Кислотный и основной катализ присоединения. Енолизация альдегидов и кетонов. Механизм этерификации кислот и получение ацеталей. Конденсации карбонильных соединений, карбоновых кислот и их производных. Нуклеофильное присоединение к альд- и кетиминам и карбоний-иммониевым ионам (реакция Манниха).

Перегруппировки в карбокатионных интермедиатах. Классификация перегруппировок: пинаколиновая и ретропинаколиновая, перегруппировка Демьянова. Перегруппировка Вагнера—Мейервейна. Перегруппировки с миграцией к атому азота (Гофмана, Курциуса, Бекмана). Реакция Байера—Виллигера.

Радикальные и ион-радикальные реакции присоединения, замещения и элиминирования. Цепные радикальные реакции. Полимеризация, теломеризация, реакции автоокисления. Ингибиторы, инициаторы и промоторы цепных реакций. Редокс-реакции. Электросинтез органических соединений.

Молекулярные реакции (*цис-транс*-изомеризация, распад молекул, размыкание циклов). Коарктатные реакции.

Согласованные реакции. Концепция сохранения орбитальной симметрии и правила Вудворда—Гофмана. Электроциклические реакции, сигматропные перегруппировки. Перициклические реакции (2+2) и (2+4)-циклоприсоединения. 1,3-диполярное циклоприсоединение.

Двойственная реакционная способность и таутомерия органических соединений. Прототропные и сигматропные перегруппировки. Правило Корнблюма. Кетоенольное равновесие. Нитросоединения и нитроновые кислоты, нитрозосоединения и оксимы. Металлотропия.

Основы фотохимии органических соединений. Синглетные и триплетные состояния, флуоресценция и фосфоресценция, интеркомбинационная конверсия. Основные типы фотохимических реакций. Явление фотохромизма.

5. Химические реакторы для процессов органического синтеза

Идеальные реакторы. Основные модели реальных реакторов. Экспериментальное определение структуры потоков и набор моделей химического реактора. Классификация химических реакторов. Особенности использования кинетических моделей химического процесса при построении математических моделей реактора. Принципы расчета размеров реакторов, состава продуктов и селективности по кинетическим данным с учетом модели реактора и уравнений теплового баланса.

Выбор типов реакторов с учетом их производительности, селективности реакций, тепловых и кинетических характеристик процесса. Принципы оптимизации параметров процесса по термодинамическим и кинетическим данным, использование экономических критериев оптимальности. Характеристика конструкций, материальных потоков, теплового режима и выбор варианта технологического оформления реакционного узла для основных гомогенных, гетерогенно-каталитических и гетерофазных процессов промышленного органического синтеза. Применение реакторов с псевдоожиженным слоем контакта, секционированных аппаратов, оптимизация потоков в реакторах. Вопросы утилизации тепла реакций и горячих потоков, энергетический и эксерогетический КПД реакторных установок. Реакторы с совмещением химического и разделительного процессов.

6. Теория методов исследования вещества в химии

Электронное строение молекул. Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом

Электронное строение двухатомных молекул (водорода, азота). Молекулярные орбитали. Теория ЛКАО. Связывающие, антисвязывающие, несвязывающие молекулярные орбитали. δ,π-орбитали. Гетероатомные полиатомные молекулы. Гибридизация и теория (метод). Электромагнитное излучение. Квантованность. Фотон. Энергия фотона. Спектр электромагнитного излучения и энергетические переходы вещества, связанные с его поглощением. Типы спектроскопии

ИК- и КР-спектроскопия

Колебательные переходы. Модель двухатомной молекулы как гармонического осциллятора. Закон Гука. Правила отбора для ИК-спектроскопии. Типы колебаний: валентные и деформационные. Симметричные и асимметричные колебания. Взаимодействие колебаний. Резонанс Ферми.

УФ-спектроскопия

Электронные переходы между молекулярными орбиталями. Теория кристаллического поля.

Спектроскопия ЯМР

Спин и магнитный момент ядра и его взаимодействие с внешним магнитным полем. Энергия ядер в магнитном поле. Экранирование ядер электронами. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность. Связь константы ССВ с геометрией молекулы. Расчет химических сдвигов ядер квантово-химическими методами.

Спектроскопии для изучения твердого тела.

Рентгенофазовый анализ. Рентгеноструктурный анализ. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Сканирующая и просвечивающая электронная микроскопия.

7. Хемоинформатика

Введение в хемоинформатику.

История применения компьютерных технологий в химии и химической технологии. Предмет хемоинформатики. Работа с программными пакетами в разных операционных системах (Windows, Linux). Понятие о виртуализации и безопасности работы в Интернет. Обзор программного обеспечения химической направленности. Обзор ресурсов по хемоинформатике.

Компьютерное представление химических структур и реакций.

Принципы представления химических объектов в компьютерном виде. Линейные и табличные представления. Идентификаторы химических соединений. Распространённые форматы представления молекул: mol, sdf, rdf, cif, pdb, InChI. Структуры Маркуша. Алгоритмы канонизации структур на примере алгоритма Моргана. Молекулярные отпечатки (хэширование данных). Элементы теории графов. Матрицы смежности. Молекулярные поверхности и формы. Конвертация форматов данных. Визуализация данных.

Химические базы данных.

Принципы работы и классификация баз данных. Поиск в базах данных. Поисковые машины. Работа с графами, коэффициенты подобия и виды структурного поиска в химических базах данных. Создание и управление базами данных химических соединений. Обзор наиболее распространённых баз данных по химии.

Молекулярные дескрипторы. Расчеты "структура–свойство".

Типы молекулярных дескрипторов: элементарные, физико-химические, топологические, электронные, геометрические и химические дескрипторы. Понятие о методах машинного обучения. Основные методы и подходы анализа связи «структура-свойство» QSAR/QSPR. Построение и валидация моделей. Библиотеки структур. Обзор программного обеспечения и интернет-ресурсов по теме QSAR/QSPR. KNIME. Компьютерная оценка фармакологических эффектов (ADMET).

Молекулярное моделирование.

Молекулярное моделирование, докинг и виртуальный скрининг. Программный пакет AutoDock. Работа с химическими ресурсами института. Работа с кластером СКЦ «Уран» в составе ЦКП ИММ УрО РАН. Информатика химических реакций. Компьютерные методы планирования химического синтеза.

Табличные процессоры для решения задач хемоинформатики и хемометрики. Применение хемонинформатики в масс-спектрометрии.

Обзор табличных процессоров (Microsoft Excel, Libre Office Calc, Google Таблицы). Предмет хемометрики. Метрология. Методы работы и веб-ресурсы. Программирование в VBA. Пакеты прикладных программ для математического анализа данных. Обзорные сведения по масс-спектрометрии. Масс-спектрометрические базы данных. Шкала Кендрика. Диаграмма Ван-Кревелена. Анализ больших данных. Метод главных компонент.

Элементы биоинформатики.

Предмет биоинформатики. Сравнение биоинформатики и хемоинформатики. Веб-ресурсы по биоинформатике. Анализ генетических последовательностей. Понятие о языке программирования Python.

Понятие о проектировании в химии.

Понятие химико-технологической системы (ХТС). Критерии инженерно-эколого-экономической эффективности производственных процессов и технологий. Анализ рисков. Программный пакет ChemCAD для моделирования и расчёта химических процессов.

2.4 Практические (лабораторные) занятия – не предусмотрены.

2.5 Самостоятельная работа

Изучение учебного материала, перенесенного с аудиторных занятий на самостоятельную проработку.

Выявление информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по следующим направлениям:

- библиография по проблемам технологии органических веществ, в том числе по теории методов исследования вещества в химии и хемоинформатике;
- публикации (в том числе электронные) источников по технологии органических веществ, в том числе по теории методов исследования вещества в химии и хемоинформатике;

- научно-исследовательская литература по актуальным проблемам технологии органических веществ, в том числе по теории методов исследования вещества в химии и хемоинформатике.

Конспектирование и реферирование первоисточников и научно-исследовательской литературы по тематическим разделам.

2.6 Контрольные работы – не предусмотрены.

2.7 Список вопросов для промежуточного тестирования – не предусмотрен.

2.8 Тематика рефератов – не предусмотрена.

2.9 Активные методы обучения (деловые игры, научные проекты) - не предусмотрены.

3. Фонд оценочных средств для контроля освоения дисциплины

3.1 Текущий контроль - в рамках собеседования по итогам освоения разделов рабочей программы дисциплины.

При текущем контроле применяется система «зачтено/не зачтено» с учетом критериев, представленных в таблице:

Оценка	Критерии
Зачтено	Аспирант показал творческое отношение к обучению, в совершенстве или в достаточной степени овладел знаниями, показал все (как минимум основные) требуемые умения и навыки
Не зачтено	Аспирант не владеет основными умениями и навыками

3.2 Промежуточный контроль - в виде экзамена кандидатского минимума.

С целью оценки уровня знаний на кандидатском экзамене используется пятибалльная система, с учетом критериев, отраженных в таблице:

Оценка (балл)	Критерии
Отлично	Аспирант показал творческое отношение к обучению, в совершенстве овладел всеми теоретическими вопросами дисциплины, показал все требуемые умения и навыки.
Хорошо	Аспирант овладел всеми теоретическими вопросами дисциплины, показал основные умения и навыки.
Удовлетворительно	Аспирант имеет недостаточно глубокие знания по теоретическим разделам дисциплины, показал не все основные умения и навыки.
Неудовлетворительно	Аспирант имеет пробелы по отдельным теоретическим разделам специальной дисциплины и не владеет основными умениями и навыками.

3.3 Итоговый контроль – в рамках итоговой аттестации.

Оценка уровня знаний при итоговом контроле осуществляется в соответствии с Положением об итоговой аттестации.

4. Учебно-методическое и информационное обеспечение

4.1 Основная литература

1. Смит В.А. Органический синтез. Наука и искусство / Пер. с англ. В. А. Смита, А. Ф. Бочкова. - М.: Мир, 2001. - 573 с.

2. Тимофеев В. С. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза: Учеб. пособие для вузов/ В. С. Тимофеев, Л. А. Серафимов. -2-е изд., перераб. М.: Высшая школа, 2003.

3. П. Сайкс, Механизмы реакций в органической химии. «Химия», 2000.

4. Потехин В. М. Основы теории химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки: учебник/ В. М. Потехин, В. В. Потехин. - СПб.: Химиздат, 2005.-910, [1] с. :а-ил.

5. О.Н. Темкин. Химия и технология металлокомплексного катализа (учебное пособие). М.: МИТХТ, 1980.

6. А.В. Зейгарник, Л.Г. Брук, О.Н. Темкин, Г.К. Шестаков Физико-химические основы реакционных процессов органического синтеза (конспект лекций), М.: МИТХТ, 2000.

7. Л.А. Серафимов, В.С. Тимофеев, Ю.А. Писаренко, А.В. Солохин. Технология основного органического синтеза. Совмещенные процессы. М.: Химия, 1993.

8. Н.Н. Лебедев. Химия и технология основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1985.

9. Литература по разделу «Теория методов исследования вещества в химии»

9.1. Хаускрофт К., Констэбл Э. Современный курс общей химии. Т1. М.: Мир, 2002, 540 с.

9.2. В.Г. Цирельсон. Квантова химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.- Бином. Лаборатория знаний. 2010. 496 с.

9.3. Драго, Р. С. Физические методы в химии: в 2 т. / Под ред. О. А. Реутова; Пер. с англ. А. А. Соловьянова. - М.: Мир, 1981. Т. 1. - 422 с.; Т. 2. - 456 с.

9.4. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. для ун-тов / Н. Ф. Степанов. - М.: Мир: Московский государственный университет, 2001. - 519 с.

10. Литература по разделу «Хемоинформатика»

10.1. Введение в хемоинформатику. Серия учебных пособий (в 5 ч.). Т.И. Маджидов и др. – Казань, издательство Казанского университета, 2013-2017.

Часть 1. Компьютерное представление химических структур / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2013. - 174 с.

Часть 2. Химические базы данных / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2015. - 188 с.

Часть 3. Моделирование «структура-свойство» / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2015. - 304 с.

Часть 4. Методы машинного обучения / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2016. - 330 с.

Часть 5. Информатика химических реакций / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2017. – 244 с.

10.2. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хёльтье и др. / М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. - 318 с. - Пер. изд. : Molecular Modeling. Basic Principles and Applications. - Weinheim, 2008. - ISBN 978-5-9963-0156-0

10.3. A.R. Leach, V.L. Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. Berlin: Springer, 2007. 250 p.

10.4. Ramachandran, K. I. Computational Chemistry and Molecular Modeling. Principles and Applications: монография / K. I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori. - Berlin: Springer, 2008. - XXI, 397 p.: ил. - Библиогр. в конце глав. - Указ.: с. 391-397. - ISBN 978-3-540-77302-3: 3167.00 р.

10.5. Chemoinformatics. Advanced Control and Computational Techniques / ed. H. G. Gilani,

K. G. Samper, R. K. Haghi. - New York: Apple Academic Press, 2013. - VIII, 204 p. - ISBN 978-1-926895-23-9.

10.6. Леск, А. Введение в биоинформатику/ - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 318 с. - Пер. изд.: Introduction to bioinformatics / A. M. Lesk. - Oxford, 2002. - ISBN 978-5-94774-501-6.

4.2 Дополнительная литература

1. Р.П. Евстигнеева, Тонкий органический синтез, М.: Химия, 1991.

2. В.С. Тимофеев, Л.А. Серафимов. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1992.

3. О.Н. Темкин, Г.К. Шестаков, Ю.А. Трегер, Ацетилен. Химия. Механизмы реакций. Технология. М.: Химия, 1991.

4. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978.

5. Пентин, Ю. А. Физические методы исследования в химии: учеб. для вузов по спец. "Химия" / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков. - М.: Мир: АСТ, 2003. - 683 с.

6. Сергеев Н. М. ЯМР-спектроскопия: учеб. пособие для химиков-органиков / Н. М. Сергеев. - [М.]: Изд-во Моск. ун-та, 1981. - 278 с.

7. Герсон, Ф. Спектроскопия ЭПР высокого разрешения: переводное издание / Ф. Герсон; под ред. А. Л. Бучаченко; пер. с англ. Ю. Б. Гребенщикова. - М.: Мир, 1973. - 214 с.

8. Tutorials in Chemoinformatics / Ed. Alexandre Varnek - Wiley-VCH. 2017, 482 p. ISBN: 978-1-119-13796-2

9. J. Gasteiger, T. Engel. Chemoinformatics/ Berlin. Springer, 2003. 649 p.

4.3 Программное обеспечение и интернет-ресурсы

Программы пакета Microsoft Office

Электронные ресурсы Центральной научной библиотеки (ЦНБ) УрО РАН (30 точек доступа) - http://cnb.uran.ru/

Электронные ресурсы, доступные в рамках централизованной (национальной) подписки на научные информационные ресурсы https://podpiska.rfbr.tu

Доступ к полным текстам статей из журналов издательства "Эльзевир" на платформе ScienceDirect в 21 предметной коллекции (Freedom Collection): https://www.elsevier.com/solutions/sciencedirect

Научная электронная библиотека http://elibrary.ru

MEDLINE: https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/

MEDLINEplus https://medlineplus.gov/

EBSCO Publishing https://www.ebsco.com/

Научные журналы издательства Taylor & Francis (UK) на электронной платформе Informaworld: https://taylorandfrancis.com/

Полные тексты международных научных журналов World Scientific Publishing: https://www.worldscientific.com/page/worldscinet

Рефераты и полные тексты статей из журналов, книги, книжных серий, электронных ссылок научных издательств:

- Springer Verlag https://link.springer.com/
- Wiley https://www.wiley.com/en-ie
-POLYMERSnetBASE https://poly.chemnetbase.com/faces/polymers/PolymerSearch.xhtml
- Chemical Abstracts https://www.cas.org/
- The Royal Society of Chemistry https://pubs.rsc.org/
- American Chemical Society http://pubs.acs.org

Базы ВИНИТИ (периодические издания, книги, фирменные издания, материалы конференций, тезисы, патенты, нормативные документы, депонированные научные работы) http://www.viniti.ru/products/viniti-database

Авторефераты диссертаций Dissertation Abstracts: https://about.proquest.com/en/

Электронные ресурсы в группе «Хемоинформатика и молекулярное моделирование» в социальной сети Вконтакте https://vk.com/chemoinformatics

Электронные ресурсы в каталоге гиперссылок официального сайта Института органического синтеза УрО РАН https://www.ios.uran.ru/page/links

5. Материальное обеспечение дисциплины

Институт располагает специально оборудованным помещением для проведения лекционных занятий.

В институте:

- создана локальная сеть, объединяющая 100 компьютеров, с выходом в Интернет;
- внедрена система корпоративной электронной почты на основе MS Exchange 2003, с возможностью удаленного доступа;
- предоставлены для пользования принтеры, сканеры и ксероксы, что способствует эффективной самостоятельной деятельности аспирантов при освоении дисциплины.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук (ИОС УрО РАН)	Программа
Рабочая программа дисциплины «Технология органических веществ» основной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре ИОС УрО РАН по научной специальности 2.6.10. Технология органических веществ	Редакция 2022 г.

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

№ редакции документа	Описание изменений	Основание	Дата вступления в действие