ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИРКУТСКИЙ ИНСТИТУТ ХИМИИ им. А.Е. ФАВОРСКОГО
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УТВЕРЖДАЮ
Директор, д.х.н.
_____А.В. Иванов
«01» марта 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ХИМИЯ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Шифр и наименование области науки:
1. Естественные науки

Шифр и наименование группы научных специальностей:
1.4. Химические науки

Шифр и наименование научных специальностей:
1.4.3. Органическая химия

Иркутск
2022

Рабочая программа составлена в соответствии с Федеральными государственными требованиями к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов), утвержденными Приказом Минобрнауки России от 20.10.2021 № 951 и Положением о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), утвержденным Постановлением Правительства РФ от 30.11.2021 № 2122.

Рабочая программа составлена д.х.н., доц. Розенцвейгом И.Б.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Ученого совета ИрИХ СО РАН (Протокол № 2 от «28» февраля 2022 г.)

1. Цели и задачи учебной дисциплины

Цель изучения дисциплины «Химия элементоорганических соединений»: приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской, инновационной и образовательной деятельности в области химии элементоорганических соединений; формирование обобщающей теоретической базы для изучения фундаментальных основ химии элементоорганических соединений и возможности их использования на практике.

Задачи:

- формирование у обучающихся современных представлений о химии элементоорганических соединений, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение навыков теоретического анализа результатов экспериментальных исследований в области химии;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов.

2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Дисциплина «Химия элементоорганических соединений» является частью образовательного компонента (Подраздел 2.1.2.2. раздела 2.1.1. «Дисциплины по выбору») программы аспирантуры по научной специальности 1.4.4. Органическая химия.

Учебная дисциплина реализуется на втором году обучения.

Знания, умения и навыки, приобретенные аспирантами по результатам изучения учебной дисциплины «Химия элементоорганических соединений», используются ими для сдачи кандидатского экзамена и при написании диссертационной работы на соискание ученой степени кандидата наук.

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

- методы получения, химические свойства и практическое использование основных классов элементоорганических соединений;
- типовые методы элементоорганического синтеза, используемые реагенты и оборудование;
- механизмы основных реакций, подходы и методы изучения механизмов;
- влияние строения на реакционную способность элементоорганических соединений;
- физико-химические методы исследования строения элементоорганических соединений и элементоорганических реакций;
- современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных в области химии элементоорганических соединений и методов поиска свойств и получения элементоорганических веществ;
- принципы теоретических расчетов свойств элементоорганических соединений, термодинамических и кинетических параметров элементоорганических реакций;
- роль и место химии элементоорганических соединений в системе фундаментальных химических наук и производстве современной инновационной продукции.

Уметь:

- выбирать методы и реагенты синтеза элементоорганических соединений;
- проводить разделение смесей элементоорганических веществ и идентификацию состава и строения с помощью химических и физико-химических методов анализа;

- осуществлять поиск методов получения и свойств элементоорганических соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем;
- проводить моделирование химических реакций с использованием полуэмпирических и неэмпирических квантово-химических методов.

Иметь опыт:

- планирования и проведения синтеза элементоорганических соединений;
- очистки элементоорганических веществ и идентификации их строения с использованием химических и физико-химических методов;
- моделирования свойств веществ и параметров элементоорганических реакций с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов и статей.

4. Структура и содержание учебной дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц (216 часов).

Структура дисциплины

Таблица 4.1. Структура учебной дисциплины

№	Наименование дисциплины	Объем учебной работы, ч							Форма контроля
		Всего	Всего аудиторн.	Из аудиторных				СР	
				Лек	Лаб	П	КСР		
1	Химия элементо-органических соединений	216	90	45	-	45	18	108	Экзамен

Содержание дисциплины

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Введение

Задачи и предмет курса. Теоретическое значение и практическое применение элементоорганических соединений. Классификация элементоорганических соединений**.**

2. Литийорганические соединения

Органические соединения лития. Методы получения и строение литийорганических соединений. Реакции литийорганических соединений. Полимеризация алкенов под действием литийорганических соединений.

3. Натрийорганические соединения

Натрийорганические соединения. Методы синтеза. Реакции натрийорганических соединений. Реакция Шорыгина. Реакция Вюрца.

4. Магнийорганические соединения

Магнийорганические соединения. Характеристика. Свойства. Реакции восстановления с участием магнийорганических соединений. Магнийорганические соединения как основания. Магнийорганические соединения как нуклеофилы. Некоторые радикальные реакции. Сравнение физических и химических свойств органических соединений лития, магния и натрия.

5. Алюминийорганические соединения

Алюминийорганические соединения. Физические и химические свойства. Основные реакции. Методы получения. Применение. Полимеризация (изотактическая и синдиотактическая).

6. Борорганические соединения

Борорганические соединения. Характеристика. Классификация. Карбораны. Дибораны. Боразол. BODIPY (БОДИПАЙ). Реакция Судзуки.

7. Кремнийорганические соединения

Кремнийорганические соединения. Классификация. Характеристика. Силаны. Силико́ны (полиорганосилоксаны). Органосилазаны. Силатраны.

8. Фосфорорганические соединения

Фосфорорганические соединения. Классификация. Структурные возможности фосфора. Таутометрия фосфорорганических соединений. Фосфины. Средние фосфиты. Кислые фосфиты. Оксиды третичных фосфинов. Средние фосфаты. Илиды фосфора. Реакция Виттига. Синтез фосфорорганических соединений. Реакция Трофимова-Гусаровой. Фосфол. Биологическая активность фосфорорганических соединений..

9. Селенорганические соединения

Селенорганические соединения. Селенолы. Селениды. Селенониевые соединения. Селеноксиды и селеноны. Селеноновые и селениновые кислоты и их производные. Селенокарбонильные соединения.

10. Теллурорганические соединения

Теллурорганические соединения. Теллуролы. Диорганилтеллуриды. Диорганилдителлуриды. Органилтеллурийтригалогениды и их производные. Теллуриновые кислоты и их производные. Диорганилтеллурийдигалогениды.

11. Фторорганические соединения

Фторорганические соединения. Особенности физико-химических свойств соединений, содержащих фтор в сравнении с негалогенированными и Cl, Br-содержащими аналогами. Методы получения и реакционная способность соединений, содержащих F при Csp^3, Csp^2-атоме. Фториды сурьмы. Реакция Шимана. Электрохимическое фторирование. Методы получения и реакции фторированных карбенов. Фторированные анионы. Фторолефины. Фторацетилены.

Разделы дисциплины и виды занятий

Таблица 4.2. Разделы дисциплины и виды занятий с указанием трудоемкости

№	Наименование разделов и тем	Виды учебной работы и трудоемкость, ч						Формы текущего контроля успеваемости
		Всего	Лек	Лаб	П	СР	КСР	
1	Введение	12	3	-	2	6	1	Собеседование
2	Литийорганические соединения	22	5	-	4	11	2	
3	Натрийорганические соединения	16	2	-	4	8	2	
4	Магнийорганические соединения	22	5	-	5	10	2	
5	Алюминийорганические соединения	20	4	-	4	10	2	

6	Борорганические соединения	20	4	-	4	10	2	Собеседование
7	Кремнийорганические соединения	20	4	-	4	11	1	
8	Фосфорорганические соединения	21	5	-	5	10	1	
9	Селенорганические соединения	21	4	-	4	11	2	
10	Теллурорганические соединения	21	4	-	4	11	2	
11	Фторорганические соединения	21	5	-	5	10	1	
Всего часов:		**216**	**45**	**-**	**45**	**108**	**18**	

Рабочей программой дисциплины «Химия элементоорганических соединений» предусмотрена самостоятельная работа обучающегося в объеме 162 ч. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

Перечень рекомендуемых видов самостоятельной работы:

- регулярная проработка пройденного на лекциях учебного материала по разделам курса;
- ознакомление с литературой в электронно-библиотечных системах, включая публикации из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок, семинаров, конференций различного уровня;
- участие в семинарах ИрИХ СО РАН по тематике курса, научно-методических семинарах лабораторий, посещение защит диссертаций на соискание ученой степени кандидата и доктора наук;
- подготовка к сдаче экзамена по курсу.

5. Организация текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения учебной дисциплины

Текущий контроль по дисциплине «Химия элементоорганических соединений» осуществляется в следующих формах: собеседование по контрольным вопросам.

Собеседование – средство контроля, организованное в форме собеседования по тематике изучаемой дисциплины, рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по всем изученным разделам, темам; свободного использования терминологии для аргументированного выражения собственной позиции.

Собеседование по контрольным вопросам и письменным ответам на вопросы оценивается в соответствии со следующими критериями: аргументированность позиции, широта используемых теоретических знаний.

Промежуточная аттестация по дисциплине «Химия элементоорганических соединений» проводится на втором году обучения в форме экзамена, предусматривающего ответы на контрольные вопросы.

Экзамен – средство, позволяющее получить экспертную оценку знаний, умений и навыков, полученных по итогам изучения дисциплины «Химия элементоорганических соединений», позволяющих аспиранту анализировать различные факты и явления в своей профессиональной области.

Результаты сдачи экзамена оцениваются как «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Критерии оценивания ответа аспиранта:

- для оценки «отлично»: наличие глубоких и исчерпывающих знаний в объеме программы курса, правильные и уверенные действия по применению теоретических знаний для решения

практических задач, грамотное и логически стройное изложение материала при ответе, знание дополнительно рекомендованной литературы;

- для оценки «хорошо»: наличие твердых и достаточно полных знаний программы курса, незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильные действия по применению теоретических знаний для решения практических задач, четкое изложение материала;

- для оценки «удовлетворительно»: наличие твердых знаний пройденного материала, изложение ответов с ошибками, уверенно исправляемыми после дополнительных вопросов, необходимость наводящих вопросов, правильные действия по применению теоретических знаний для решения практических задач;

- для оценки «неудовлетворительно»: наличие грубых ошибок в ответе, непонимание сущности излагаемого вопроса, неумение применять знания на практике, неуверенность и неточность ответов на дополнительные и наводящие вопросы.

Дисциплина считается освоенной, если обучающийся получил оценку «отлично», «хорошо», «удовлетворительно».

Оценочные средства для проведения текущего контроля

Примерные темы для проведения собеседований

1. Теоретические представления о природе химических связей и электронном строении элементоорганических соединений.

Классификация элементоорганических соединений (ЭОС). Основные этапы развития химии ЭОС. Ее влияние на теорию химического строения молекулярных систем.

Основные положения квантовой химии. Уравнение Шредингера для атомно-молекулярной системы как основа для теоретического исследования ее структуры и электронного строения. Электронное строение атомов и их ионов. Атомные орбитали и их классификация.

Анализ электронного строения молекул в терминах эффективных зарядов на атомах и заселенной (порядков) связей.

Сопряженные молекулы как лиганды в ЭОС. Электронное строение сопряженных молекул в электронном приближении. Метод Хюккеля. Схемы электронных уровней энергий и МО аллила, бутадиена, аниона циклопентадиенила, бензола циклооктатетраена.

Концепция ароматичности в химии ЭОС. Примеры металлоорганических ароматических систем.

Природа химических связей в ЭОС. Гибридные орбитали и принципы их использования в качественной теории химического строения. Классификация типов химических связей в ЭОС. Природа связи в олефиновых, ацетиленовых, циклопентадиенильных и ареновых комплексах переходных металлов. Кратные связи элемент-углерод и элемент-элемент. Многоцентровые связи.

Симметрия молекул и ее использование в теории химического строения ЭОС.

Молекулярные орбитали в олефиновых, аллильных, циклопентадиенильных и ареновых комплексах. Химические связи в электронодефицитных молекулах (на примерах простейших и полиэдрических гидридов бора и карборанов).

Качественные способы оценки стабильности ЭОС. Правило эффективного атомного номера. Принцип изолобальной аналогии и его приближения.

Теоретические основы стереохимии ЭОС. Понятие о конформациях и конфигурациях. Координационные полиэдры, характерные для координационных чисел 4,5,6. Хиральность полиэдронов с моно- и бидентатными лигандами. Планарная хиральность и оптическая активность металлокомплексов с олефиновыми, циклопентадиенильными, ареновыми лигандами.

2. Реакционная способность элементоорганических соединений.

Основные типы реагентов (электрофилы, нуклеофилы, протофилы, радикофилы,карбеноиды). Классификация основных типов реакций с участием ЭОС. Реакции

по связи металл-лиганд (реакция замещения, присоединения, элиминирования, фрагментации, внедрения, окислительного присоединения, восстановительного элиминирования).

Превращения лигандов в координационной сфере металлов (структурно нежесткие соединения, внутримолекулярные перегруппировки и молекулярная динамика ЭОС (таутометрия, металлотропия, внутренние вращения вокруг связи металл-лиганд).

Окислительно-восстановительные превращения металлоогранических соединений.

Различия в строении и свойствах ЭОС в газовой, жидкой и твердой фазах. Роль полярности среды и специфической сольвации. Ионы и ионные пары, их реакционная способность. Равновесная СН-кислотность, шкалы СН-кислотности, влияние строения СН-кислот на равновесную СН-кислотность, кинетическая кислотность СН-кислот.

3. Физические методы исследования структуры и электронного строения ЭОС.

ЯМР-спектроскопия (импульсная ЯМР-фурье спектроскопия, динамический ЯМР) в исследовании строения и реакционной способности ЭОС. Физические и теоретические основы метода. Понятие об основных ЯМР-параметрах: химическом сдвиге, константах спин-спинового взаимодействия, временах релаксации. Области применения в химии ЭОС: изучение строения и динамики молекул, определение примесей.

Масс-спектрометрия. Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии ЭОС: установление состава и строения молекул, качественный и количественный анализ смесей (хромат о-масс-спектрометрия), определение микропримесей, изотопный анализ, измерение термохимических параметров (энергии ионизации молекул, энергии появления ионов, энергии диссоциации связей), изучение ионно-молекулярных реакций, газофазная кислотность и основность молекул.

Метод рентгеноструктурного анализа (РСА). Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии ЭОС: установление строения молекул и кристаллов, исследование природы химических связей.

Фото- (ФЭС) и рентгенофотоэлектронная (ЭСХА) спектроскопии. Физические и теоретические основы методов. Применение в химии ЭОС: изучение электронного строения молекул, измерение энергий ионизации.

Оптическая спектроскопия (ИК, УФ, КР). Физические и теоретические основы методов. Применение в химии ЭОС: установление строения молекул, изучение динамики молекул, измерение концентрации. Применение симметрии при интерпретации экспериментальных спектров.

Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Физические и теоретические основы методов. Применение в химии ЭОС: установление строения радикалов, изучение динамики молекул и механизмов радикальных реакций.

4. Органические производные непереходных элементов.

Органические производные щелочных металлов (I группа).

Литийноорганические соединения, их свойства, строение, методы получения и применение в органическом синтезе.

Органические соединения натрия и калия.

Реакция металлирования. Ароматические анион-радикалы: образование, строение, свойства.

Органические производные элементов II группы.

Магнийорганические соединения: получение, строение, свойства. Роль растворителя в синтезе магнийорганических соединений. Реакционная способность магнийорганических соединений и их применение в органическом и металлоорганическом синтезе.

Органические производные элементов XII группы.

Цинк- и кадмийорганические соединения: получение, строение, свойства. Реакция Реформатского.

Органические соединения ртути: получение, строение, свойства. Меркурирование ароматических соединений. Реакция Несмеянова.

Симметризация и диспропорционирование ртутьорганических соединений. Ртутьорганические соединения в синтезе органических производных других металлов и органическом синтезе.

Органические производные элементов III группы.

Борорганические соединения. Основные типы соединений, синтез, свойства, реакции. Гидроборирование ненасыщенных соединений, региоселективность реакции. Применение борорганических соединений в органическом синтезе.

Карбораны, металлокарбораны, получение, свойства. Основные типы карборанов. Икосаэдрические карбораны, основные реакции.

Алюминийорганические соединения. Основные типы соединений, синтез, свойства, реакции. Катализаторы Циглера-Натта. Применение алюминийорганических соединений в промышленности и органическом синтезе.

Органические производные элементов XIII группы.

Галлий-, индий- и талийорганические соединения: получение, строение, свойства. Применение талийорганических соединений в органическом синтезе.

Получение полупроводниковых материалов методом газофазного разложения галлий- и индийорганических соединений.

Сравнительная реакционная способность органических производных элементов XIII группы.

Органические производные элементов XIV группы.

Кремнийорганические соединения: получение, строение, свойства.

Гидросилилирование ненасыщенных производных. Полиорганосилоксаны. Силиловые эфиры. Кремнийорганические соединения в органическом синтезе и промышленности.

Германий-, олово- и свинцеорганические соединения. Основные типы соединений, получение, строение, свойства и реакции. Представление о гипервалентных соединениях. Практическое использование органических производных элементов XIV группы.

Соединения элементов XIV группы с s-связью элемент-элемент: синтез, строение, свойства.

Соединения элементов XIV группы с кратными связями элемент-элемент: синтез, строение, свойства. Проблема двоесвязанности в химии Эос непереходных элементов.

Органические производные элементов XV группы.

Органические производные фосфора и мышьяка, основные типы соединений высшей и низшей степеней окисления, методы синтеза, строения, свойства. Гетероциклические соединения фосфора. Реакция Виттига. Применение оргических производных элементов V группы в промышленности, сельском хозяйстве, медицине.

Сурьма и висмуторганические соединения.

5. Органические производные переходных металлов.

Классификация металлоорганических соединений переходных металлов по типу лигандов, координированных с металлом.

Карбонильные комплексы переходных металлов.

Основные типы карбонилов металлов. Методы синтеза, строение и реакции. Карбонилат анионы, карбонил галогениды, карбонилгадриды. Природа связи металл-карбонил.

Металлкарбонильные кластеры переходных металлов. Основные типы, получение. Стереохимическая нежесткость: миграция карбонильных, гидридных, углеводородных лигиндов и металлического остова. Превращения углеводородов на кластерных карбонилах металлов.

Практическое применение карбонилов металлов.

Гидридные комплексы переходных металлов.

Основные типы водородных комплексов переходных металлов. Соединения с водородным атомом: моно-, би- и полиядерные. Соединения с терминальным и мостиковым атомами водорода. Соединения с молекулярным водородом: синтез, строение, свойства. Характер связи металл-водород, ее полярность, возможность диссоциации. Взаимные превращения водородных комплексов и органических соединений переходных металлов. Роль водородных комплексов в металлоорганическом синтезе и катализе.

Карбеновые и карбиновые комплексы переходных металлов.

Карбеновые комплексы переходных металлов. Электронное строение. Карбеновые комплексы Фишера. Карбеновые комплексы Шрока. Методы синтеза карбеновых комплексов

Фишера (по Фишеру, по Лэпперту). Реакции карбеновых комплексов Фишера (нуклеофильное присоединение к С), депротонирование связей С-Н. Роль карбеновых комплексов в катализе(метатезис олефинов). Использование в тонком органическом синтезе. Реакция Детца. Метатезис циклических алкенов. Карбиновые комплексы переходных металлов. Электронное строение. Карбиновые комплексы Фишера. Карбиновые комплексы Шрока. Синтез карбиновых комплексов действием кислот Льюиса на карбеновые комплексы Фишера. Реакции карбиновых комплексов с нуклеофильными реагентами. Роль карбиновых комплексов в катализе: метатезис и полимеризация алкинов.

Комплексы переходных металлов.

Общая характеристика строения и устойчивости. Различные типы связей металл-лиганд. Структурно-нежесткие соединения. Внутренняя динамика молекул.

Комплексы металлов с олефинами.

Типы комплексов с линейными и циклическими моно- и полиолефинами. Методы получения, строение, свойства. Природа связи олефина с металлов. Циклобутадиенжелезотрикарбонил. Роль олефиновых комплексов в катализе.

Ацетиленовые комплексы.

Типы ацетиленовых комплексов. Методы получения, строение, свойства. Моно- и биметаллические комплексы. Ацетилен-винилиденовая перегруппировка в координационной сфере металлов как метод синтеза винилиденовых комплексов. Ацетиленовые комплексы в катализе.

Аллильные комплексы.

Типы аллильные комплексов. Методы синтеза, строение, реакции. Роль в катализе.

Циклопентадиенильные комплексы.

Типы комплексов. Строение. Металлоцены: ферроцен, никелецен, кобальтоцен. Синтез. Реакционная способность (замещение в лиганде, реакции с разрывом связи металл-кольцо, редокс-реакции). Металлоценилалкильные катионы. Циклопентадиенильные производные титана и циркония. Типы комплексов. Синтез, применение в катализе процессов полимеризации. Циклопентадиенилкарбонильные комплексы. Синтез. Химия циклопентадиенилмарганецтрикарбонила (цимантрена).

Циклопентадиенилкарбонильные комплексы железа, кобальта, молибдена.

Ареновые комплексы.

Типы ареновых комплексов. Бис-ареновые комплексы хрома. Методы получения и реакции. Аренхромтрикарбонильные комплексы. Методы получения и реакции. Применение в органическом синтезе. Катионные ареновые комплексы железа и марганца. Синтез и реакции..

Би- и полиядерные соединения переходных металлов.

Линейные би- и полиядерные соединения переходных металлов: синтез, строение, свойства. Природа связи металл-лиганд. Соединения с кратными связями металл-металл. Кластерные (каркасные) соединения переходных металлов. Важнейшие структурные типы кластеров, их минимальные и максимальные размеры. Электронное строение. Свойства и динамика молекул.

Каталитические процессы с участием металлорганических соединений переходных металлов.

Олигомеризация олефинов и ацетиленов. Никелевые комплексы в катализе олигомеризации этилена. Циклоолигомеризация (системы, содержащие никель (0) и линейная олигомеризация бутадиена (системы, содержащие палладий (0)). Циклическая тримеризация и тетрамеризация ацетиленов (синтез производных бензола и циклооктатетраена).

Полимеризация олефинов: катализаторы Циглера-Натта, полиэтилен, полипропилен. Стереоспецифическая полимеризация бутадиена.

Изомеризация олефинов: миграция двойной связи с участием металлалкильных и металлаллильных интермедиатов. Реакция метатезиса олефинов.

Гомогенное гидрирование: комплексы с молекулярным водородом, механизмы активации водорода, родиевые, кобальтовые и рутениевые катализаторы. Селективное гидрирование. Асимметрическое гидрирование.

Каталитические превращения моноуглеродных молекул; оксо-синтез: кобальтовые и родиевые катализаторы. Синтез Фишера-Тропша. Конферсия водяного газа. Карбонилирование и гадрокарбонилирование.

Окисление олефинов: эпоксидирование, катализируемое переходными металлами. Получение ацетальдегида и винилацетата из этилена.

Аллильное алкилирование CH-, NH- и OH-органических соединений в условиях металлокомплексного катализа. Моно-, ди- и полидентатныве лиганды. Хиральные лиганды и асиммертический синтез.

Метатезис олефинов и ацетиленов. Реакция кросс-сочетания.

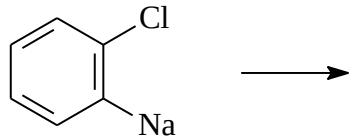
Основные представления биометаллорганической химии.

Понятие о металлоферментах: хлорофилл, цитохромы, ферредоксины, витамин B12; строение и биологические функции. Применение металлоорганических соединений в медицине.

Органические соединения f- элементов. Представления об органических соединениях f-элементов. Важнейшие структурные типы, методы синтеза, природа связи, динамика молекул.

Примеры контрольных вопросов для проведения собеседования

1. Перечислите элементы органогены.
2. Приведите 3 примера элементоорганических соединений с донорно-акцепторной связью.
3. Расположите связи C-Li, C-Na, C-Mg в порядке увеличения степени ионности.
4. Перечислите причины, влияющие на реакционную способность связей C-Элемент.
5. Напишите схему взаимодействия тетрахлорида олова с фениллитием.
6. Каким образом можно увеличить реакционную способность литийорганических соединений.
7. Предскажите региоселективность литиирования мета-диметоксибензола. Напишите схему реакции.
8. Укажите сферу применения литийдиалкилкупратов. Приведите пример.
9. В чем наиболее важное отличие реакционной способности соединения $Na^{+}[Ph_2Li]^{-}$, от фениллития.
10. Напишите схему реакции Вюрца, выбрав произвольные реагенты. Назовите исходные вещества и продукты.
11. Предложите схему разложения следующего соединения:



Назовите вещества.

12. Каким образом получают амид натрия. Напишите схему.
13. Почему диэтиловый эфир и тетрагидрофуран как правило не используют при проведении натрийорганического синтеза.
14. В чем отличие реакции магнийорганических соединений с хлоридом меди и хлоридом ртути. Объясните, в чем причины этих отличий. Приведите схемы реакций на примере превращений этилмагнийбромида.
15. Приведите схему получения трифенилфосфина с использованием магнийорганического синтеза.
16. Изобразите схему получения тиофенола с использованием магнийорганического синтеза.
17. Приведите схему взаимодействия этилмагнийбромида с хлоридом меди.
18. Назовите четыре типа реакций, характерных для магнийорганических соединений. Приведите примеры.
19. Что такое реактив Иванова. Укажите электронные эффекты, существующие в молекуле такого соединения. Приведите конкретный пример и схему синтеза.
20. Что образуется при взаимодействии алюминия со стиролом и водородом. Приведите схему реакции.

21. Перечислите кратко (без схем реакций) сферу применения алюминийорганических соединений
22. Объясните, почему в качестве восстановителей используют изопропилзамещенные производные алюминия.
23. Объясните роль катализаторов Циглера-Натта в процессе получения стереорегулярных полимеров.
24. Изобразите общую формулу карборанов. Какова классификация карборановых систем в соответствии с «дефектами» полиэдральной структуры карборанов.
25. Завершите схему реакции, назовите вещества:

$$HCB_{10}H_{10}CH + NaNH_2 \longrightarrow$$

26. Изобразите формулу клозо-1,2-дикарбадодекаборана(12). Какие изомеры имеет это вещество. Изобразите схему его синтеза и галогенирования.
27. Изобразите формулу боразола. Изобразите схему его получения, галогенирования под действием трибромида бора, разложения под действием воды и взаимодействия с бензолом в присутствии кислот Льюиса.
28. Каковы основные отличия атома углерода и атома кремния в углеводородах и их кремнийсодержащих аналогах.
29. Изобразите схему реакции литийалюмогидрида с четыреххлористым кремнием. Назовите продукты.
30. Сравните основность гексаметилдисилазана и ди-(третбутил)амина. Обоснуйте ответ, изобразите формулы веществ.
31. Напишите схему гидролиза триэтилсилана.
32. Приведите схему перегруппировки Арбузова на примере взаимодействия триметилфосфита и иодэтана.
33. В чем отличие реакционной способности эфиров карбоновых кислот и средних фосфатов? Приведите схему превращения триалкилфосфата в диалкилфосфат с помощью триметилхлорсилана.
34. Приведите схему реакции Тодда-Аттертона на примере взаимодействия диэтилфосфита, метанола и тетрахлорметана.
35. Что такое бетаин? Изобразите механизм реакции Виттига. В чем, по-вашему, заключается движущая сила такого превращения.
36. Расположите соединения в порядке увеличения кислотности:EtSeH, EtSH, EtTeH, EtOH. Назовите вещества.
37. Изобразите схемы получения поли(этилендиокси)селенофена и поли(этилендиокси)теллурофена. Укажите сферу применения этих полимеров.
38. Изобразите схемы возможных реакций этанселенола с эпихлоргидрином. Назовите образующиеся вещества. Укажите механизм возможных реакций.
39. Приведите схемы трех любых реакций с участием любых по вашему выбору конкретных диорганидителлуридов. Назовите реагенты и продукты реакций.
40. Перечислите наиболее важные методы получения соединений, содержащих фрагмент $F\text{-}C^{sp3}$. Ответ сопроводите схемами соответствующих реакций.
41. Качественно сопоставьте наиболее важные физические и химические свойства алканов и перфторалканов. Объясните, чем обусловлены отличия свойств алифатических углеводородов от соответствующих свойств их фторированных производных.
42. Сопоставьте способность атома фтора к нуклеофильному замещению для полифторалканов, полифторолефинов и полифтораароматических соединений.
43. Изобразите возможные изомеры 1-фтор-2-хлорэтилена и 1,2-дихлорэтилена. Какой из изомеров более стабилен для 1-фтор-2-хлорэтилена, а какой для 1,2-дихлорэтилена и почему?
44. Сопоставьте на качественном уровне кислотность трифторуксусной и трихлоруксусной кислот, трифторакриловой и трихлоракриловой кислот, пентафторфенола и пентахлорфенола. Изобразите формулы веществ, прокомментируйте влияние атомов фтора и хлора на кислотность соединений.

45. Верно ли предположение о том, что более электроотрицательный фтор должен лучше стабилизировать соответствующий тригалогенметильный анион, чем хлор и бром. Расположите бромоформ, хлороформ и трифторметан в порядке увеличения кислотности. Объясните зависимость кислотности от структуры. Изобразите формулы веществ.

Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

Экзаменационный билет состоит из трех теоретических вопросов, тематика которых представлена в программе кандидатского экзамена.

Образцы билетов
Химия элементоорганических соединений

Билет 1

1. Классификация элементоорганических соединений. Основные этапы развития химии элементоорганических соединений. Ее влияние на теорию химического строения молекулярных систем.
2. Литийорганические соединения, их свойства, строение, методы получения и применение в органическом синтезе. Органические соединения натрия и калия.
3. Возможности применения спектроскопии ЯМР в химии элементоорганических соединений.

Билет 2

1. Концепция ароматичности в химии элементоорганических соединений. Примеры металлорганических ароматических систем.
2. Магнийорганические соединения: получение, строение, свойства. Роль растворителя в синтезе магнийорганических соединений.
3. Масс-спектрометрия. Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии элементоорганических соединений.

Билет 3

1. Природа химических связей в элементоорганических соединениях. Кратные связи элемент-углерод и элемент-элемент. Многоцентровые связи.
2. Цинк- и кадмийорганические соединения: получение, строение, свойства.
3. Метод рентгеноструктурного анализа. Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии элементоорганических соединений.

Билет 4

1. Теоретические основы стереохимии элементоорганических соединений. Понятие о конформациях и конфигурациях.
2. Органические соединения ртути: получение, строение, свойства.
3. Оптическая спектроскопия (ИК, УФ, КР). Физические и теоретические основы методов. Применение в химии элементоорганических соединений.

Билет 5

1. Основные типы реагентов (электрофилы, нуклеофилы, карбеноиды и др.) в химии элементоорганических соединений.
2. Борорганические соединения: строение, синтез, свойства, реакции.
3. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса. Физические и теоретические основы метода и применение в химии элементоорганических соединений.

Билет 6

1. Классификация основных типов реакций с участием металлоорганических соединений.
2. Карбораны, металлокарбораны, получение, свойства.

3. Возможности применения спектроскопии ЯМР в химии элементоорганических соединений.

Билет 7

1. Различия в строении и свойствах ЭОС в газовой, жидкой и твердой фазах. Роль полярности среды и специфической сольватации. Ионы и ионные пары, их реакционная способность.

2. Алюминийорганические соединения: синтез, свойства, реакции. Катализаторы Циглера-Натта. Применение алюминийорганических соединений в промышленности и органическом синтезе.

3. Масс-спектрометрия. Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии элементоорганических соединений.

Билет 8

1. Классификация элементоорганических соединений. Основные этапы развития химии элементоорганических соединений. Ее влияние на теорию химического строения молекулярных систем.

2. Галлий-, индий- и таллийорганические соединения: получение, строение, свойства, применение.

3. Метод рентгеноструктурного анализа. Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии элементоорганических соединений.

Билет 9

1. Концепция ароматичности в химии элементоорганических соединений. Примеры металлорганических ароматических систем.

2. Кремнийорганические соединения: получение, строение, свойства, применение. Представление о гипервалентных соединениях.

3. Оптическая спектроскопия (ИК, УФ, КР). Физические и теоретические основы методов. Применение в химии элементоорганических соединений.

Билет 10

1. Природа химических связей в элементоорганических соединениях. Кратные связи элемент-углерод и элемент-элемент. Многоцентровые связи.

2. Германий-, олово- и свинецорганические соединения.

3. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса. Физические и теоретические основы метода и применение в химии элементоорганических соединений.

Билет 11

1. Теоретические основы стереохимии элементоорганических соединений. Понятие о конформациях и конфигурациях.

2. Соединения элементов XIV группы с σ -связью элемент-элемент. Соединения элементов XIV группы с кратными связями элемент-элемент.

3. Возможности применения спектроскопии ЯМР в химии элементоорганических соединений.

Билет 12

1. Основные типы реагентов (электрофилы, нуклеофилы, карбеноиды и др.) в химии элементоорганических соединений.

2. Органические производные фосфора и мышьяка, основные типы соединений высшей и низшей степеней окисления, методы синтеза, строение, свойства. Применение органических производных элементов V группы в промышленности, сельском хозяйстве, медицине.

3. Масс-спектрометрия. Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии элементоорганических соединений.

Билет 13

1. Классификация основных типов реакций с участием металлоорганических соединений.

2. Металлоцены: ферроцен, никелецен, кобальтоцен. Синтез. Реакционная способность. Металлоценилалкильные катионы. Циклопентадиенильные производные титана и циркония. Синтез, применение в катализе. Циклопентадиенилкарбонильные комплексы.

3. Метод рентгеноструктурного анализа. Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии элементоорганических соединений.

Билет 14

1. Различия в строении и свойствах ЭОС в газовой, жидкой и твердой фазах. Роль полярности среды и специфической сольватации. Ионы и ионные пары, их реакционная способность.

2. Каталитические процессы с участием металлорганических соединений переходных металлов.

3. Оптическая спектроскопия (ИК, УФ, КР). Физические и теоретические основы методов. Применение в химии элементоорганических соединений.

Билет 15

1. Классификация элементоорганических соединений. Основные этапы развития химии элементоорганических соединений. Ее влияние на теорию химического строения молекулярных систем.

2. Понятие о металлоферментах: хлорофилл, цитохромы, ферредоксины, витамин B_{12}, строение и биологические функции. Применение металлорганических соединений в медицине.

3. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса. Физические и теоретические основы метода и применение в химии элементоорганических соединений.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература

1. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 1 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 567 с.
2. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 2 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 623 с.
3. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 3 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 544 с.
4. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 4 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 726 с.
5. Смит, В. А. Основы современного органического синтеза. Учебное пособие / В. А. Смит, А. Д. Дильман. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 750 с.
6. Эльшенбройх, К. Металлоорганическая химия / К. Эльшенбройх. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 750 с.

Дополнительная литература

1. Афанасьев, Б. Н. Физическая химия / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. – М.: Лань, 2012. – 464 с.
2. Барышок, В. П. Вездесущий животворный кремний; монография / В. П. Барышок, М. Г. Воронков. – Иркутск: ИрГТУ, 2014. – 276 с.
3. Воронков, М. Г. Генезис и эволюция химии органических соединений германия, олова и свинца / М. Г. Воронков, К. А. Абзаева, А. Ю. Федорин; ИрИХ им. А. Е. Фаворского СО РАН. – Новосибирск: Академическое изд-во «Гео», 2012. – 214 с.

4. Воронков, М. Г. О химии и жизни: 70 лет идей, исследований и свершений / М. Г. Воронков; ИрИХ им. А. Е. Фаворского СО РАН. – Новосибирск: Академическое изд-во «Гео», 2014. – 410 с.
5. Воронков, М. Г. Силаноны. От эфемеров к мономерам, олигомерам и полимерам / М. Г. Воронков, С. В. Басенко; ИрИХ им. А. Е. Фаворского СО РАН. – Новосибирск: Академическое изд-во «Гео», 2014. – 142 с.
6. Гонсалвес, К. Наноструктуры в биомедицине / К. Гонсалвес, К. Хальберштадт, К. Лоренсин, Л. Наир – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2013. – 520 с.
7. Горшков, В. И. Основы физической химии / В. И. Горшков, И. А. Кузнецов. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 407 с.
8. Жауен, Ж. Биометаллоорганическая химия / Ж. Жауен. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. – 496 с.
9. Илиел, Э. Основы органической стереохимии / Э. Илиел. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 703 с.
10. Кленин, В. И. Высокомолекулярные соединения / В. И. Кленин, И. В. Федусенко. – М.: Лань, 2013. – 512 с.
11. Коваленко, Л. В. Биохимические основы химии биологически активных веществ: учебное пособие / Л. В. Коваленко. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014 – 229 с.
12. Лау, А. К. Нано- и биокомпозиты / А. К. Лау, Ф. Хусейн, Х. Лафди. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. – 392 с.
13. Носова, Э. В. Фторсодержащие азины и бензазины / Э. В. Носова, Г. Н. Липунова, В. Н. Чарушин, О. Н. Чупахин. – Екатеринбург: УрО РАН, 2011. – 455 с.
14. Рыжонков, Д. И. Наноматериалы: учебное пособие / Д. И. Рыжонков, В. В. Лёвина, Э. Л. Дзидзигури. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 365 с.
15. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 557 с.
16. Солдатенков, А. Т. Пестициды и регуляторы роста: прикладная органическая химия / А. Т. Солдатенков, Н. М. Колядина, А. Ле Туан. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 223 с.
17. Старостин, В. В. Материалы и методы нанотехнологии: учебное пособие / В. В. Старостин. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 431 с.
18. Травень, В. Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: В 3-ех т. Т. 1 / В. Ф. Травень. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 368 с.
19. Травень, В. Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: В 3-ех т. Т. 2 / В. Ф. Травень. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 517 с.
20. Травень, В. Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: В 3-ех т. Т. 3 / В. Ф. Травень. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 388 с.
21. Хельвинкель, Д. Систематическая номенклатура органических соединений / Д. Хельвинкель. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 232 с.
22. Чернова, С. В. Фармацевтическая химия: учебник для вузов / С. В. Чернова; под ред. Г. В. Раменской. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. – 472 с.
23. Юровская, М. А. Химия ароматических гетероциклических соединений / М. А. Юровская. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. – 208 с.

Электронные ресурсы

1. Биометаллоорганическая химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / под ред. Жауэна Ж.; пер. с англ. В.П. Дядченко, К.В.Зайцева. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 505 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/66354. — Загл. с экрана.
2. Бухаров, С.В. Технология тонкого органического синтеза. Ч. III. Элементоорганические соединения [Электронный ресурс]: учебное пособие / С.В. Бухаров, И.З. Илалдинов, Г.Ю. Климентова, Г.Н. Нугуманова. — Электрон. дан. — Казань: КНИТУ, 2006. — 72 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/13344. — Загл. с экрана.

3. Романовский, Б.В. Основы катализа [Электронный ресурс]: учебное пособие / Б.В. Романовский. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 175 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94126. — Загл. с экрана.
4. Хайруллин, Р.А. Методы получения органических и элементоорганических соединений [Электронный ресурс]: учебное пособие / Р.А. Хайруллин, М.Б. Газизов, Л.Р. Багаува, А.И. Перина. — Электрон. дан. — Казань: КНИТУ, 2016. — 324 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/102069. — Загл. с экрана.
5. Эльшенбройх, К. Металлоорганическая химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / К. Эльшенбройх; пер. с нем. Ю. Ф. Опруненко, Д. С. Перекалина. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 749 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94112. — Загл. с экрана.

Рекомендуемые источники научно-технической информации

Научно-технические журналы из библиотечного фонда ИрИХ СО РАН:

1. Вестник Российской академии наук.
2. Высокомолекулярные соединения. Серия А: Физика полимеров.
3. Высокомолекулярные соединения. Серия Б: Физика полимеров.
4. Доклады академии наук.
5. Журнал общей химии.
6. Журнал органической химии.
7. Журнал прикладной химии.
8. Журнал структурной химии.
9. Известия Академии наук. Серия химическая.
10. Успехи химии (электронный журнал).
11. Химико-фармацевтический журнал.
12. Химия в интересах устойчивого развития.
13. Химия гетероциклических соединений.
14. Электрохимия.
15. Journal of Sulfur Chemistry.
16. Mendeleev Communications.

Электронно-библиотечные системы профессиональные базы данных, информационные справочные и поисковые системы:

1. Химическая реферативная служба Американского химического общества CAS SciFinder https://sso.cas.org/
2. База данных Elsevier: Reaxys+Reaxys Medicinal Collection https://www.reaxys.com/.
3. The Cambridge Crystallographic Data Centre: база данных CSD-Enterprise https://www.ccdc.cam.ac.uk/
4. База данных медицинских и биологических публикаций PubMed https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/.
5. База данных Академия Google https://scholar.google.ru/.
6. Федеральный институт промышленной собственности http://www1.fips.ru.
7. Федеральная служба по интеллектуальной собственности http://www.rupto.ru.
8. The United States Patent and Trademark Office http://www.uspto.gov.
9. The European Patent Office http://ep.espacenet.com.
10. Academic Reference – база данных полнотекстовых англоязычных ресурсов по всем академическим дисциплинам, опубликованных в Китае https://ar.cnki.net.
11. База цитирования Elsevier B.V.: Scopus https://www.scopus.com.
12. База цитирования РИНЦ https://www.elibrary.ru/.
13. База данных электронно-библиотечной системы «Лань» https://e.lanbook.com/.

14. Ресурсы удаленного доступа и базы данных ФГБУН Государственной публичной научно-технической библиотеки СО РАН http://www.spsl.nsc.ru/.
15. Электронно-библиотечная система Центральной научной библиотеки ИНЦ СО РАН (на базе АИБС «Ирбис») http://csl.isc.irk.ru/.
16. Elsevier: Science Direct Complete Freedom Collection https://www.elsevier.com/, http://www.sciencedirect.com.
17. George Thieme Verlag: коллекция журналов Thieme по химии https://www.thieme.com/.
18. Royal Society of Chemistry: база данных RSC DATABASE https://www.rsc.org/.
19. Wiley: Коллекция журналов Database Collection https://onlinelibrary.wiley.com/.
20. Справочно-правовая система "ГАРАНТ" https://internet.garant.ru/ .
21. Сайт ВАК Минобрнауки РФ https://vak.minobrnauki.gov.ru/.
22. Электронная информационно-образовательная среда ИрИХ СО РАН http://eios-irich.com.ru/moodle/.
23. Портал для аспирантов и соискателей ученой степени: http://www.аспирантура.рф/.

Бесплатные официальные открытые ресурсы Интернет:

1. Directory of Open Access Journals (DOAJ) http://doaj.org/
   Ресурс объединяет более 10000 научных журналов по различным отраслям знаний (около 2 миллионов статей) из134 стран мира.
2. Directory of Open Access Books (DOAB) https://www.doabooks.org/
   В базе размещено более 3000 книг по различным отраслям знаний, предоставленных 122 научными издательствами.
3. BioMed Central https://www.biomedcentral.com/
   База данных включает более 300 рецензируемых журналов по биомедицине, медицине и естественным наукам. Все статьи, размещенные в базе, находятся в свободном доступе.
4. Электронный ресурс arXiv https://arxiv.org/
   Крупнейшим бесплатный архив электронных научных публикаций по разделам физики, математики, информатики, механики, астрономии и биологии. Имеется подробный тематический каталог и возможность поиска статей по множеству критериев.
5. Коллекция журналов MDPI AG http://www.mdpi.com/
   Многодисциплинарный цифровой издательский ресурс, является платформой для рецензируемых научных журналов открытого доступа, издающихся MDPI AG (Базель, Швейцария). Издательство выпускает более 120 разнообразных электронных журналов, находящихся в открытом доступе.
6. Издательство с открытым доступом InTech http://www.intechopen.com/
   Первое и крупнейшее в мире издательство, публикующее книги в открытом доступе, около 2500 научных изданий. Основная тематическая направленность - физические и технические науки, технологии, медицинские науки, науки о жизни.
7. База данных химических соединений ChemSpider http://www.chemspider.com/
   ChemSpider – это бесплатная химическая база данных, предоставляющая быстрый доступ к более чем 28 миллионам структур, свойств и соответственной информации. Ресурс принадлежит Королевскому химическому обществу Великобритании (Royal Society of Chemistry).
8. Коллекция журналов PLOS ONE http://journals.plos.org/plosone/
   PLOS ONE – коллекция журналов, в которых публикуются отчеты о новых исследованиях в области естественных наук и медицины. Все журналы размещены в свободном доступе (Open Access), все статьи проходят строгое научное рецензирование.

7. Материально-техническое обеспечение научно-исследовательской работы

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Химия элементоорганических соединений» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

Для реализации образовательного процесса в форме лекций и практических занятий используются следующие помещения: универсальная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью; малый лекционный зал (библиотека), оснащенный компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет, учебной мебелью и демонстрационным оборудованием.

Для освоения программы обучения и для выполнения практических и научно-исследовательских работ по теме диссертации каждому аспиранту предоставлено индивидуальное рабочее место, оборудованное приточно-вытяжной вентиляцией, водопроводом, водоотведением, воздуховодом. Аспиранты имеют возможность использовать материально-технические средства лабораторий, в которых выполняют диссертационные работы (оргтехника, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование).

Программное обеспечение:

Лицензионные продукты:

- Microsoft Office 2010 Russian Academic Open;
- Microsoft Office Professional 2010 Russian Academic Open;
- Zoom – система видеоконференцсвязи с возможностью обмена сообщениями и передачей контента в режиме реального времени.

Свободно распространяемое ПО: браузер Google Chrome67, Mozilia Firefox 60.02, Opera53; Pascal ABC 3.3; система текстовой, голосовой и видеосвязи связи Skype7.41.0.101; программа для создания электронных учебных продуктов Moodle 3.2.; программа для просмотра электронных документов Foxit PDF Reader 9.1.0.5096; архиватор 7zip 17.01 beta.

Приборная база:

Основу материально-технической базы института составляют два цифровых мультиядерных Фурье-спектрометра ЯМР (DPX 400 и AVANCE 400), рентгеновский дифрактометр Bruker D8 ADVANCE, рентгеновский дифрактометр D2 PHASER, инфракрасный Фурье-спектрометр Vertex 70 с Раман приставкой, инфракрасный Фурье-спектрометр Excalibar HE 3100 Varian, микроанализатор Flash EA 1112 CHN-O/MAS 200, микроанализатор Termo Flash EA 2000 CHNS, ЭПР-спектрометр ELEXSYS E580, установка наносекундного импульсного фотолиза, хроматомасс-спектрометр QP-5050A, хроматомасс-спектрометр Agilent 5975 с химической ионизацией, тандемный TOF/TOF масс-спектрометр Ultra Flex, электронный микроскоп TM 3000 Hitachi, спектрофлуориметр FLPS920 Edinburg Instruments, УФ/ВИД-спектрометр LAMBDA 35 и диэлькометр.

Для проведения квантово-химических расчетов имеются компьютеры в лабораториях и вычислительный кластер 39Гц/112Гб/14Тб.

Лицензионное программное обеспечение, встроенное в соответствующие приборные комплексы, являющееся его неотъемлемой частью, обеспечивающей функционирование приборов:

- Gaussian 09, Пакет квантово-химических программ, для расчета геометрии и электронных характеристик молекул.
- Apex 2, Apex 3, Программы для обработки данных монокристального дифрактометра;
- CCDC (ConQuest, Mercury, DASH, Mogul, Hermes), Кристаллографическая база данных и пакет программ для работы с базой данных;
- TurboMol, Пакет квантово-химических программ, для расчета геометрии и электронных характеристик молекул;
- XWinNMR, Программа для записи и обработки данных спектрометра ЯМР;
- TOPAS, EVA, Программы для обработки данных порошкового дифрактометра;
- PDF-2, База данных порошковых дифрактограм неорганических соединений;
- ResolutionsPro Opus, Пакет программ, для записи и обработки ИК-спектров;
- Lambda35, Программа для записи и обработки УФ-спектров;

- Программа Flexanalysis 3.3 для обработки массива данных по биополимерам, нелетучих биомакромолекул, олигомерам, синтетическим полимерам, солям и нелетучих веществ;
- Xepr, XSophe, XeprView, Пакет программ для записи и обработки спектров ЭПР.
  С открытой лицензией:
- Dalton2016, пакет квантово-химических программ, используемых для расчета, изучения свойств веществ, моделирования реакций;
- DIRAC, программа для атомных и молекулярных прямых итеративных релятивистских вычислений на всех электронах, вычислений молекулярных свойств с использованием релятивистских квантово-химических методов;
- ORCA software, пакет квантово-химических программ, используемых для расчета, изучения свойств веществ, моделирования реакций.