

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИОС УрО РАН
д.х.н. Е.В. Вербицкий
Приказ от 16.03.2022 г. № 29

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)

ПРОГРАММА
КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА
дисциплина «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

Программа кандидатского экзамена по дисциплине «Технология органических веществ» основной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре института по научной специальности 2.6.10. Технология органических веществ.

Программа разработана:

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

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

Содержание

1. Общие сведения	4
2. Содержание программы	4
Теоретические основы технологии органических веществ	
Проектирование химико-технологических процессов и контроль качества продукции	
Перспективы развития промышленности органического синтеза	
Теория методов исследования вещества в химии	
Хемоинформатика	
3. Критерии оценки знаний, используемые при приеме кандидатского экзамена	10
4. Список рекомендуемой литературы	10
5. Программное обеспечение и интернет-ресурсы	12

1. Общие сведения

Программа определяет требования к содержанию кандидатского экзамена по дисциплине «Технология органических веществ» программы аспирантуры ИОС УрО РАН по научной специальности 2.6.10. Технология органических веществ.

Программа составлена в соответствии с:

- постановлением Правительства РФ от 30.11.2021 г. № 2122 «Об утверждении Положения о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)»;
- приказом Минобрнауки России от 20.10.2021 г. № 951 «Об утверждении федеральных государственных требований 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)»;
- рабочей программой дисциплины «Технология органических веществ», утвержденной приказом ИОС УрО РАН от 14.03.2022 № 25 «О рабочих программах аспирантуры института по научной специальности 2.6.10. Технология органических веществ»;
- тематикой научных исследований ИОС УрО РАН.

2. Содержание программы

I. Теоретические основы технологии органических веществ

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).

Квантово-химические 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 карбокатионы и карбоанионы. 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 атомов 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 др.

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 нитроирования, 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. Деаминарование, способ Грисса и новые модификации. Реакция Зандмейера. Замена диазогруппы на другие заместители.

Окисление. Общие закономерности. Реакции окисления по атому углерода. Окисление металлических 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 металлорганических соединений. Реактивы Гриньяра. Восстановление под действием металлов (Na, Mg, Zn). Условия проведения реакций, механизм, стереохимия.

Окислительно-восстановительные реакции. Реакции Оппенгауэра—Мейервейна—Пондорфа. Условия проведения и механизм. Реакция Канниццаро—Тищенко.

Реакции элементоорганических соединений (ЭОС). 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 С–Н-связей в ацетиленовых и ароматических соединениях. Защита N–H связей. Образование новой N–С-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 С–Н-кислотами. Получение аминокислот по Штреккеру Альдольно-кетоновая 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, гидроксила, 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. Принципы технологии органического синтеза

Основные направления развития органического синтеза (ОС) как отрасли. Специфика и системные закономерности этой отрасли. Экологическая характеристика отрасли и ее отдельных производств. Проблемы, стоящие перед отраслью органического синтеза. Общие подходы к созданию безотходных энергосберегающих производств и перспективы развития последних. Ключевые принципы, используемые при создании безотходных производств и их классификация.

Методологические принципы. Роль системного подхода в создании безотходных производств.

Химические принципы. Создание малостадийных химических производств. Разработка методов получения продуктов из доступного и дешевого сырья. Разработка высокоэффективных процессов. Применение «сопряженных» методов получения продуктов. Разработка технологий, позволяющих достигать высоких конверсий. Совмещение нескольких реакций, направленных на получение одного и того же целевого продукта.

Технологические принципы. Использование рециркуляции по компонентам и потокам. Применение совмещенных процессов. Полнота выделения продуктов из реакционной смеси. Разработка процессов с низким энергопотреблением. Полнота использования энергии системы. Разработка технологии с минимальным расходом воды и использованием ее кругооборота. Полнота использования газовых потоков и очистка газовых выбросов. Применение аппаратов и технологических линий большой единичной мощности. Применение непрерывных процессов. Полнота использования жидких и твердых отходов. Высокая степень автоматизации. Обеспечение высокой надежности и стабильности работы химико-технологической системы.

Организационные принципы. Особенности применения принципов при создании безотходных производств. Необходимость использования полной совокупности принципов (т.е. системного подхода) для оценки эффективности технологии. Понятие предельно эффективной технологии. Экономическое обоснование безотходной технологии. Алгоритм разработки безотходного производства. Последовательность выбора оптимального варианта безотходной технологии.

4. 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. Явления азеотропии, хемиазеотропии и полиазеотропии. Предельные законы фазового равновесия (законы Рауля и Дальтона). Анализ статистики 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 H₂. Влияние процессов массообмена на кинетику гетерогенно-каталитических реакций. Кинетика в условиях кинетической, внешне- и внутренидиффузионных 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.

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 псевдооживленным слоем контакта, секционированных аппаратов, оптимизация потоков в реакторах. Вопросы утилизации тепла реакций и горячих потоков, энергетический и эксергетический КПД реакторных установок. Реакторы с совмещением химического и разделительного процессов.

6. Теоретические основы и практика использования разделительных и реакционно-массообменных процессов в промышленности органического синтеза

Научные основы типовых методов очистки сырья от вредных примесей и его осушки. Особенности схем подготовки сырья на примере процессов хлорирования, окисления, гидрирования и др.

Научные основы разделения реальных многокомпонентных смесей методами ректификации, экстракции, экстрактивной и азеотропной ректификации, жидкостной экстракции, абсорбции, адсорбции, хемосорбции и др. Принцип перераспределения полей концентраций между областями разделения. Вопросы выбора экстрагентов, экстрактивных и азеотропных агентов, сорбентов: характеристика их разделяющей способности. Основы статики разделительных процессов. Синтез и анализ технологических схем разделения. Разделение полиазеотропных многокомпонентных гомогенных и расслаивающихся смесей. Кинетика тепло- и массопереноса, моделирование разделительной аппаратуры, методы расчета.

Сравнительная оценка и выбор методов разделения многокомпонентных смесей, технологических схем разделения и аппаратуры для них. Оптимизация процессов разделения и технологических схем. Понятие разделительного комплекса функционального действия. Типовые комплексы и схемы переработки и разделения продуктов основного органического синтеза.

Сопоставление совмещенных и рециркуляционных вариантов оформления реакционно-массообменных процессов. Общая стратегия исследования и разработки реакционно-массообменных процессов. Оценка влияния разделения на степень конверсии и селективность химического превращения. Применение анализа статики для выделения оптимальных вариантов организации реакционно-ректификационных процессов.

Методы очистки сточных вод, отходящих газов в промышленности органического синтеза.

II. Проектирование химико-технологических процессов и контроль качества продукции

1. Математическое моделирование химико-технологических процессов

Математическая модель химической системы. Моделирование реакторов периодического действия, полунепрерывного и непрерывного действия. Моделирование отклонений гидродинамики реактора непрерывного действия от идеальных моделей. Составление математической модели структуры потока по экспериментальным данным. Моменты распределения времени пребывания, ячеечная модель.

2. Применение ЭВМ при создании, проектировании и управлении производством

Математическое описание процессов химического превращения, кинетических моделей. Математические модели химических реакторов. Расчет их параметров с помощью ЭВМ.

Математическое моделирование фазовых равновесий жидкость–пар, жидкость–жидкость, жидкость–жидкость–пар, в том числе с химической реакцией.

Моделирование с помощью ЭВМ различных массообменных аппаратов, технологических комплексов. Основы моделирования совмещенных реакционно-ректификационных процессов и аппаратов для их осуществления.

Роль ЭВМ в автоматизации исследований и проектировании технологических установок, а также в управлении ими.

3. Методы выделения продуктов из реакционной массы и очистки соединений

Фильтрация, центрифугирование, экстракция, ионный обмен, перегонка жидких продуктов при различном давлении, перекристаллизация, дробная кристаллизация эвтектических смесей. Использование сверхкритических сред. Принципы выбора оборудования.

4. Методы контроля качества полученных продуктов

Использование методов ГЖХ, ВЭЖХ, электронной спектроскопии, ЯМР. Химические методы. Определение содержания основного вещества в продукте.

5. Разработка ТУ, ОСТа, ГОСТа и Фармстатьи

III. Перспективы развития промышленности органического синтеза

1. Основные концепции развития промышленности органического синтеза

Пути экономии материальных, энергетических и людских ресурсов, снижение капитальных затрат. Решение задач по охране окружающей среды и технике безопасности. Различные способы совмещения, позволяющие решить эти вопросы. Широкое использование принципов создания безотходных технологий при разработке промышленных процессов органического синтеза. Совмещение различных реакций с массообменными процессами, совмещение нескольких реакций, нескольких массообменных процессов и в целях проведения их в одном аппарате. Физико-химические основы и технологические принципы создания направленно-совмещенных реакционно-ректификационных процессов. Способы их организации и оптимизации. Вопросы системного подхода при разработке, проектировании и анализе производств основного органического синтеза. Историческое развитие, современное состояние и перспективы расширения сырьевой базы органического синтеза. Пути совершенствования производств олефинов, ароматических углеводородов, ацетилена, оксида углерода и др.

2. Состояние, перспективы и пути совершенствования основных процессов органического синтеза

Историческое развитие, современное состояние, перспективы и пути совершенствования основных процессов органического синтеза на базе исследования общесистемных закономерностей и методы повышения их экономической эффективности. Повышение надежности, устойчивости к внешним воздействиям технологических установок и отдельных аппаратов, меры снижения технологических единиц за счет совмещения процессов и стадий, внедрение аппаратуры, технологических линий большой единичной мощности, разработка основ материало- и энергосберегающих технологий.

Вопросы разработки и применения автоматизированных систем научных исследований и проектирования производств.

IV. Теория методов исследования вещества в химии

1. 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

2. 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.

3. УФ-спектроскопия

Электронные переходы между молекулярными орбиталями. Теория кристаллического поля.

4. 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.

5. Спектроскопии для изучения твердого тела

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

V. Хемоинформатика

1. 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.

2. 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.

3. 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.

4. 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).

5. 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.

6. Табличные процессоры для решения задач хемоинформатики и хемометрики. Применение хемоинформатики 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.

7. Элементы биоинформатики

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

8. Понятие о проектировании в химии

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

3. Критерии оценки знаний, используемые при приеме кандидатского экзамена

Оценка уровня знаний производится по пятибалльной шкале согласно критериям, приведенным в таблице.

Оценка	Критерии
Отлично	1. Ответы на поставленные вопросы излагаются логично, последовательно и не требуют дополнительных пояснений. 2. Демонстрируются глубокие знания по дисциплине. 3. Делаются обоснованные выводы. 4. Ответ самостоятельный, используются знания, приобретенные ранее. 5. Даны исчерпывающие определения основных понятий.
Хорошо	1. Ответы на поставленные вопросы даются уверенно и последовательно. 2. Демонстрируется умение анализировать материал, но не все выводы носят аргументированный и доказательный характер. 3. Материал излагается в основном правильно, но требуются дополнительные уточнения. 4. Допускаются небольшие неточности при выводах и определении понятий.
Удовлетворительно	1. Допускаются нарушения в последовательности изложения материала при ответе. 2. Демонстрируется поверхностное знание дисциплины. 3. Имеются затруднения с выводами. 4. Определения понятий даются не четко, с большими неточностями.
Неудовлетворительно	1. Материал излагается непоследовательно, сбивчиво, не представляет определенной системы знаний по дисциплине. 2. Ответ не отражает содержание вопроса. 3. Не даются ответы на уточняющие вопросы комиссии. 4. Допускаются грубые ошибки в определении понятий.

4. Список рекомендуемой литературы

4.1. Основная литература

1. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. М.: Химия, 1977; 2000.
2. Физер Л., Физер М. Органическая химия. Т. 1, 2, М.: Химия, 1986.
3. Евстигнеева Р.П. Тонкий органический синтез. М.: Химия, 1991.
4. МакОми Дж. Защитные группы в органическом синтезе. М.: Мир, 1976.
5. Тимофеев В.С., Серафимов Л.А. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1992.
6. Темкин О.Н. Химия и технология металлокомплексного катализа: Учеб. пособие. М.: МИТХТ, 1980.
7. Физико-химические основы реакционных процессов органического синтеза (конспект лекций) / А.В. Зейгарник, Л.Г. Брук, О.Н. Темкин, Г.К. Шестаков. М.: МИТХТ, 2000.
8. Технология основного органического синтеза. Совмещенные процессы / Л.А. Серафимов, В.С. Тимофеев, Ю.А. Писаренко, А.В. Солохин. М.: Химия, 1993.
9. Адельсон С.В., Вишнякова Т.П., Паушкин Л.М. Технология нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1985.
10. Лебедев Н.Н. Химия и технология основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1985.
11. Литература по разделу «Теория методов исследования вещества в химии»
- 11.1. Хаускрофт К., Констэбл Э. Современный курс общей химии. Т1. М.: Мир, 2002, 540 с.

- 11.2. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.- Бином. Лаборатория знаний. 2010. 496 с.
- 11.3. 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.
- 11.4. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. для ун-тов / Н. Ф. Степанов. - М.: Мир: Московский государственный университет, 2001. - 519 с.
12. Литература по разделу «Хемоинформатика»
- 12.1. 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.
- 12.2. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хельте 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
- 12.3. A.R. Leach, V.L. Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. Berlin: Springer, 2007. 250 p.
- 12.4. Ramachandran, K. I. Computational Chemistry and Molecular Modeling. Principles and Applications: монография / K. I. Ramachandran, G. Deera, 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 p.
- 12.5. Chemoinformatics. Advanced Control and Computational Techniques / ed. H. G. Gilani, K. G. Samper, R. K. Naghi. - New York: Apple Academic Press, 2013. - VIII, 204 p. - ISBN 978-1-926895-23-9.
- 12.6. 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. Жаров В.Т., Серафимов Л.А. Физико-химические основы дистилляции и ректификации. Л.: Химия, 1975.
2. Лебедев Н.Н., Манаков М.Н., Швец В.Ф. Теория технологических принципов основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1984.
3. Киперман С.Л. Основы химической кинетики в гетерогенном катализе. М.: Химия, 1979.
4. Темкин О.Н., Шестаков Г.К., Трегер Ю.А. Ацетилен. Химия. Механизмы реакций. Технология. М.: Химия, 1991.
5. Химическая энциклопедия. Т. 1–5. М.: Большая рос. энциклопедия, 1997–1998.
6. Handbook of Industrial Chemistry. Organic Chemicals: справочное издание / ed. Ali M. F. [et al.]. - New York [et al.]: McGraw-Hill, 2005. - XI, 628 с.
7. Wittcoff, Harold A. Industrial Organic Chemicals: научное издание / H.A. Wittcoff, B.G. Reuben, J.S. Plotkin. - Second Ed. - [New Jersey]: John Wiley & Sons, 2004. - XXXI, 662с.
8. Платэ Н.А. Основы химии и технологии мономеров: Учеб. пособие для техн. вузов/ Н. А. Платэ, Е. В. Сливинский. -М.: Наука: Наука/ Интерпериодика, 2002. - 696 с.
9. Потехин В.М. Основы теории химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки: учебник/ В.М. Потехин, В. В. Потехин. -СПб.: Химиздат, 2005.-910.
10. Смит В.А. Органический синтез. Наука и искусство / Пер. с англ. В.А. Смита, А.Ф. Бочкова. - М.: Мир, 2001. - 573 с.
11. 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. - 536 с.
12. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии: Учеб. пособие для вузов по спец. "Органическая химия"/ А.Т. Лебедев. -М.: БИНОМ. Лаборатория Знаний, 2003. - 493 с.
13. Мазалов Л.Н. Рентгеновские спектры/ Л. Н. Мазалов; отв. ред. С. В. Борисов. -Новосибирск, 2003. - 329 с.
14. Кунце У. Основы качественного и количественного анализа: Учеб. пособие для вузов хим. спец./ У. Кунце, Г. Шведт; пер. А.В. Гармаш. -М.: Мир, 1997. - 424 с.
15. Правила проведения сертификации в системе сертификации лекарственных средств (системы ГОСТ Р).
16. Литература по разделу «Теория методов исследования вещества в химии»
- 16.1. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978.
- 16.2. 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.

- 16.3. Сергеев Н. М. ЯМР-спектроскопия: учеб. пособие для химиков-органиков / Н. М. Сергеев. - [М.] : Изд-во Моск. ун-та, 1981. - 278 с.
- 16.4. 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.
17. Литература по разделу «Хемоинформатика»
- 17.1. Tutorials in Chemoinformatics / Ed. Alexandre Varnek - Wiley-VCH, 2017, 482 p. ISBN: 978-1-119-13796-2
- 17.2. J. Gasteiger, T. Engel. Chemoinformatics/ Berlin. Springer, 2003. 649 p.

5. Программное обеспечение и интернет-ресурсы

Архивы полнотекстовых журналов на сайте научной электронной библиотеки (<http://elibrary.ru>)

