

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИОС УрО РАН
д.х.н. _____ Е.В. Вербицкий
Приказ от 14.03.2022 г. № 24

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 «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

образовательного компонента основной образовательной программы высшего образования - программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре института по научной специальности 1.4.3. Органическая химия

Шифр и название области науки 1. Естественные науки

Шифр и название группы научных специальностей 1.4. Химические науки

Шифр и название научной специальности 1.4.3. Органическая химия

Отрасли науки, по которым присуждаются ученые степени Химические Технические

Форма обучения – Очная

Срок обучения – 4 года

Рабочая программа дисциплины «Органическая химия» образовательного компонента основной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре института по научной специальности 1.4.3. Органическая химия.

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 1.4.3. Органическая химия,
- базовому плану обучения по программе аспирантуры ИОС УрО РАН по научной специальности 1.4.3. Органическая химия;

- подготовлена с учетом тематики научных исследований ИОС УрО РАН.

Дисциплина «Органическая химия» 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 общим закономерностям химического поведения органических соединений во взаимосвязи со строением и проявлением их в различных условиях.

Задача дисциплины - обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний по органической химии для выполнения аспирантами 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:

- Современные представления о природе химической связи;
- Стереохимия органических соединений;
- Общие принципы реакционной способности;
- Основные типы органических реакций и их механизмы;
- Принципы современного органического синтеза;
- Теория методов исследования вещества в химии;
- Хемоинформатика.

Виды контроля:

- текущий – зачет (2 семестр);
- промежуточный - кандидатский экзамен (6 семестр);
- итоговый – 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.

Слепухиным П.А., доц. отдела аспирантуры ИОС УрО РАН к.х.н.

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
Современные представления о природе химической связи	
Сtereoхимия органических соединений	
Общие принципы реакционной способности	
Основные типы органических реакций и их механизмы	
Принципы современного органического синтеза	
Теория методов исследования вещества в химии	
Хемоинформатика	
3. Фонд оценочных средств для контроля освоения дисциплины	11
4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	12
5. Материальное обеспечение дисциплины	14

1. Общая характеристика дисциплины

1.1 Цели и задачи изучения дисциплины

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов системы углубленных профессиональных знаний по общим закономерностям химического поведения органических соединений во взаимосвязи со строением и проявлением их в различных условиях.

Задача дисциплины - обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний по органической химии для выполнения аспирантами научного компонента программы аспирантуры

1.2 Требования к результатам освоения 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;
- самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий;
- к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям в избранной области деятельности.

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	Современные представления о природе химической связи	10	4	0	0	6
2	Стереохимия органических соединений	16	6	0	0	10
3	Общие принципы реакционной способности	30	10	0	0	20
4	Основные типы органических реакций и их механизмы	30	12	0	0	18
5	Принципы современного органического синтеза	8	2	0	0	6
6	Теория методов исследования вещества в химии	25	10	0	0	15
7	Хемоинформатика	25	10	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. *Современные представления о природе химической связи*

Электронные представления о природе связей. Типы связей в органической химии. Гибридизация атомов углерода и азота. Электронные эффекты. Электроотрицательность атомов и групп.

Основные положения квантовой химии. Атомные и молекулярные орбитали. Приближение МО-ЛКАО. Метод МО Хюккеля и более строгие квантово-химические методы расчета.

Понятие о полуэмпирических методах, основанных на приближении Хартри—Фока (MNDO, AM1, PM3 и др.). Методы *ab initio*. Метод функционала плотности (DFT). Понятие о резонансе (сопряжении) в классической и квантовой химии. Сопряжение в методе МО Хюккеля. Концепция ароматичности. Правило Хюккеля. Мезоионные соединения. Антиароматичность.

2. *Стереохимия органических соединений*

Пространственное строение органических молекул. Пространственное взаимодействие несвязанных атомов и групп, ван-дер-ваальсовы радиусы.

Понятие о конформации молекулы. Вращение вокруг связей: величины и симметрия потенциальных барьеров. Факторы, определяющие энергию конформеров. Влияние эффектов сопряжения на стабильность конформеров. Номенклатура конформеров. Угловое напряжение и другие типы напряжения в циклических системах.

Средние циклы и трансаннулярные взаимодействия. Инверсия циклов и азотсодержащих соединений.

Связь конформации и реакционной способности. Принцип Кертина—Гаммета. Стерический и стереоэлектронный контроль реакций. Стереоселективность и стереоспецифичность.

Пространственное строение этиленовых и диеновых систем. Номенклатура геометрических изомеров. Конформация диенов и триенов. Атропоизомерия.

Энантиомерия. Асимметрия и хиральность. Эквивалентные, энантиотопные и диастереотопные группы; их проявление в химическом поведении молекул в хиральных и ахиральных средах и спектрах ЯМР. Номенклатура оптических антиподов. Неуглеродные атомы как центры хиральности.

Способы получения и разделения энантиомеров. Оптическая чистота и методы ее определения. Определение абсолютной и относительной конфигурации. Понятие о дисперсии оптического вращения и круговом дихроизме.

3. Общие принципы реакционной способности

Классификация реакций по типу образования и разрыва связей в лимитирующей стадии, по типу реагента и по соотношению числа молекул реагентов и продуктов.

Теория переходного состояния. Гиперповерхность потенциальной энергии, координата и энергетический профиль реакции. Термодинамические параметры активации. Кинетические уравнения основных типов реакций. Методы экспериментального изучения кинетики и механизмов реакций. Метод стационарного состояния (принцип Боденштейна). Постулат Хэммонда.

Эмпирический (экстратермодинамический) подход к реакционной способности. Корреляционные уравнения, принцип линейности свободных энергий Гиббса. Уравнения Гаммета и Тафта. Связь параметров корреляционных уравнений с механизмом реакций. Принцип ЖМКО; его обоснование на основе теории возмущений МО.

Количественная теория кислот и оснований. Кислоты Бренстеда и Льюиса. Кислотно-основное равновесие. Понятие рН. Кинетическая и термодинамическая кислотность. Уравнение Бренстеда. Общий и специфический кислотно-основный катализ. Суперкислоты. Функции кислотности. Постулат Гаммета.

Влияние среды на скорости и равновесие органических реакций. Специфическая и неспецифическая (универсальная) сольватация. Клеточный эффект. Водородная связь. Классификация и шкалы параметров растворителей. Влияние сольватации на скорость и равновесие органических реакций. Уравнения Уинстейна и Грюнвальда, Копеля-Пальма. Кислотность и основность в газовой фазе.

Ассоциация ионов. Типы ионных пар и доказательства их существования. Влияние ассоциации ионов на их реакционную способность. Уравнение Акри.

Межфазный катализ. Краун-эфир, криптанды, поданды, катализаторы межфазного переноса. Понятие о супрамолекулярной химии.

Основные типы интермедиатов.

Карбениевые ионы (карбокатионы). Генерация карбокатионов в растворах и в газовой фазе. Влияние структурных и сольватационных факторов на стабильность карбокатионов. Строение карбокатионов. Понятие о неклассических ионах. Основные типы реакций карбокатионов и области их синтетического использования. Скелетные перегруппировки и гидридные сдвиги в карбокатионах.

Карбанионы и СН-кислоты. Влияние структурных и эффектов среды на стабилизацию карбанионов. Основные реакции карбанионов, анионные перегруппировки. Амбидентные и полидентные анионы. Карбены. Электронная структура, синглетное и триплетное состояние карбенов. Методы генерации карбенов и использование их в органическом синтезе. Нитрены, их генерация, строение и свойства.

Свободные радикалы и ион-радикалы. Методы генерирования радикалов. Электронное строение и факторы стабилизации свободных радикалов. Типы стабильных

свободных радикалов. Основы методов ЭПР и ХПЯ. Катион- и анион-радикалы. Методы генерирования и свойства. Основные реакции ион-радикалов. Комплексы с переносом заряда.

4. Основные типы органических реакций и их механизмы

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 синергетическое ускорение, участие соседних групп, перегруппировки в ходе нуклеофильного замещения. Корреляционные уравнения Суэйна—Скотта и Эдвардса.

Нуклеофильное замещение при кратной углерод-углеродной связи и в ароматическом ядре. Типичные механизмы нуклеофильного замещения у sp^2 -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 гетероциклах. 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. Стереoeлектронные 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 C-C. 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 Корнблума. Кетонольное 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. Принципы современного органического синтеза

Выбор оптимального пути синтеза. Принцип ретросинтетического анализа. Линейные и конвергентные схемы синтеза. Синтоны и синтетические эквиваленты. Защита функциональных групп. Методы введения и удаления защитных групп. Основные пути построения углеродного скелета.

Методы введения важнейших функциональных групп и пути перехода от одних функций к другим.

Элементоорганические соединения (производные фосфора, бора, кремния, меди, лития, магния, олова) в органическом синтезе. Металлокомплексный катализ.

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 органической химии, в том числе по теории методов исследования вещества в химии и хемоинформатике;
- публикации (в том числе электронные) источников по органической химии, в том числе по теории методов исследования вещества в химии и по хемоинформатике;

- научно-исследовательская литература по актуальным проблемам органической химии, в том числе по теории методов исследования вещества в химии и по 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. Березин Б.Д., Березин Д.Б. Курс современной органической химии. – М.: Высшая школа, 2001.
2. Петров А.А., Бальян Х.В., Троценко А.Т. Органическая химия. – С Пб: Иван Федоров, 2002.
3. Ким А.М. Органическая химия. – Новосибирск: Сиб. универ. изд-во, 2002.
4. Литература по разделу «Теория методов исследования вещества в химии»
 - 4.1. Хаускрофт К., Констэбл Э. Современный курс общей химии. Т1. М.: Мир, 2002, 540 с.
 - 4.2. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.- Бином. Лаборатория знаний. 2010. 496 с.
 - 4.3. 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.
 - 4.4. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. для ун-тов / Н. Ф. Степанов. - М.: Мир: Московский государственный университет, 2001. - 519 с.
 5. Литература по разделу «Хемоинформатика»
 - 5.1. 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.
 - 5.2. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хельтье 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
 - 5.3. A.R. Leach, V.L. Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. Berlin: Springer, 2007. 250 p.
 - 5.4. 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 p.
 - 5.5. 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.
 - 5.6. 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

4. Ингольд К. Теоретические основы органической химии. М.: Мир, 1973. – 1экз.
5. Кери Ф., Сандберг Р. Углубленный курс органической химии. Кн. 1, 2. М.: Химия, 1981.
6. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. Вводный курс. М.: Химия, 2000.

7. Структура и реакционная способность органических анион-радикалов: научное издание / А.И. Русаков [и др.]. - М.: Мир, 2005. - 294 с.
8. Моррисон, Дж. Асимметрические органические реакции / Д. Моррисон; пер. с англ. Е.И. Клабуновского. - М.: Мир, 1973. - 510 с.
9. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
10. Потапов В.М. Стереохимия. М.: Химия, 1988.
11. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. Ч. 1-4. М.: Изд-во МГУ, 1999.
12. Марч Дж. Органическая химия, Т. 1-4. М.: Мир, 1987.
13. Титце Л., Айхер Т. Препаративная органическая химия. Реакции и синтезы в практикуме органической химии и научно-исследовательской лаборатории. М.: Мир, 1999.
14. Органикум: Практикум по органической химии / Г. Беккер, В. Бергер и др. Т. 1, 2. М.: Мир, 1992.
15. Новые пути органического синтеза: Практ. использование переходных металлов / [Х.М. Колхуан, Д. Холтон, Д. Томпсон, М. Твигг]; Пер. с англ. М.С. Ермоленко, В.Г. Киселева. - М.: Химия, 1989. - 400 с.
16. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978.
17. 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.
18. Сергеев Н. М. ЯМР-спектроскопия: учеб. пособие для химиков-органиков / Н. М. Сергеев. - [М.] : Изд-во Моск. ун-та, 1981. - 278 с.
19. 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.
20. Tutorials in Chemoinformatics / Ed. Alexandre Varnek - Wiley-VCH. 2017, 482 p. ISBN: 978-1-119-13796-2
21. 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.ru>

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.

