



Программа кандидатского экзамена по дисциплине «Органическая химия» по основной образовательной программе высшего образования – программе подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре института по научной специальности 1.4.3. Органическая химия.

Программа разработана:

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

Салоутиным В.И., руководитель программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре института по научной специальности 1.4.3. Органическая химия чл.-корр. РАН, проф. отдела аспирантуры ИОС УрО РАН д.х.н., проф.

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. Общие сведения	4
2. Содержание программы	4
2.1 Современные представления о природе химической связи	
2.2 Стереохимия органических соединений	
2.3 Общие принципы реакционной способности	
2.4 Основные типы органических реакций и их механизмы	
2.5 Принципы современного органического синтеза	
2.6 Теория методов исследования вещества в химии	
2.7 Хемоинформатика	
3. Критерии оценки знаний, используемые при приеме кандидатского экзамена	7
4. Список рекомендуемой литературы	7
5. Программное обеспечение и интернет-ресурсы	9

## 1. Общие сведения

Программа определяет требования к содержанию кандидатского экзамена по дисциплине «Органическая химия» программы аспирантуры ИОС УрО РАН по научной специальности

### 1.4.3. Органическая химия.

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 «Органическая химия», утвержденной приказом ИОС УрО РАН от 14.03.2022 № 24 «О рабочих программах аспирантуры института по научной специальности 1.4.3. Органическая химия»;
- тематикой научных исследований ИОС УрО РАН.

## 2. Содержание программы

### 2.1. 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.

### 2.2. 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.

### 2.3. 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 pH. Кинетическая и термодинамическая кислотность. Уравнение Бренстеда. Общий и специфический кислотно-основной 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 равно-весие органических реакций. Уравнения Уинштейна и Грюнвальда, Коппеля-Пальма. Ки-слотность 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-эфиры, 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 полиидентные 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.

#### **2.4. 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<sup>2</sup>-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 С-С. Механизм процесса. Влияние структуры нуклеофила и субстрата и эффектов среды на скорость и направление реакции. Реакция Михаэля. Анионная полимеризация олефинов.

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

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

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

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

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

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

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

### **2.5. 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.

### **2.6. 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.  $\delta, \pi$ -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.

### **2.7. Хемоинформатика**

Понятие о хемоинформатике и связанных с ней дисциплинах. Исторические аспекты.

Основные ресурсы по хемоинформатике (библиография и Интернет).

Представление химических структур в компьютерном виде. Молекулярные поверхности.

Линейные форматы представления химических молекул и табличное представление. Графы.

Вопросы конвертации форматов.

Важнейшие химические базы данных. Библиографический и структурный поиск. Коэффициенты подобия.

Основные возможности систем SciFinder и Reaxys.

Химические дескрипторы. Их классификация и программные средства для расчёта. QSAR / QSPR.

Визуализация химических структур и соответствующие программные пакеты.

Программные пакеты для выполнения квантово-химических расчётов. Возможности работы с СКЦ «Уран».

Докинг. Основные этапы и программное обеспечение для проведения докинга.

Задачи хемоинформатики в приложении к масс-спектрометрии. Решение частных задач с применением экспертных систем и табличных процессоров.

Хемо- и биоинформатика. Сходство и отличия. Хемометрика.

### 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

#### Основная литература

1. Ингольд К. Теоретические основы органической химии. М.: Мир, 1973.
2. Марч Дж. Органическая химия, Т. 1-4. М.: Мир, 1987.
3. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. Ч. 1-4. М.: Изд-во МГУ, 1999.
4. Кери Ф., Сандберг Р. Углубленный курс органической химии. Кн. 1, 2. М.: Химия, 1981.
5. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. Вводный курс. М.: Химия, 2000.
6. Джилкрист Т.Л. Химия гетероциклических соединений. М.: Мир, 1996.
7. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
8. Потапов В.М. Стереохимия. М.: Химия, 1988.
9. Титце Л., Айхер Т. Препаративная органическая химия. Реакции и синтезы в практикуме органической химии и научно-исследовательской лаборатории. М.: Мир, 1999.
10. Органикум: Практикум по органической химии / Г. Беккер, В. Бергер и др. Т. 1, 2. М.: Мир, 1992.
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. Namboti. - 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.

### Дополнительная литература

1. Гринберг А.А. Введение в координационную химию. М.-Л.: Химия, 1966.
2. Кукушкин Ю.Н. Химия координационных соединений. М.: Высшая школа, 1985, гл. 13-15.
3. Координационная химия редкоземельных элементов/ Под ред. В.И. Спицына М. МГУ, 1979.
4. Яцимирский К.Б. Введение в бионеорганическую химию. Киев: Наукова думка, 1976.
5. Грибов Б.Г., Домрачев Г.А., Осаждение пленок и покрытий разложением металлоорганических соединений, М.: Наука, 1981.
6. Разуваев Г.А., Грибов Б.Г., Домрачев Г.А., Саламатин Б.А. Металлоорганические соединения в электронике. М.: Наука, 1972.
7. Пожарский А.Ф. Теоретические основы химии гетероциклов. М.: Химия, 1985.
8. Марч Дж. Органическая химия. М.: Мир, 1987.
9. Гудлицкий М. Химия органических соединений фтора. М.: Госхимиздат, 1961.
10. Шепард У., Шартс К. Органическая химия фтора. М.: Мир, 1972.
11. Соколов В.И. Введение в теоретическую стереохимию. М.: Химия, 1983.
12. Потапов В.М. Стереохимия. М.: Химия.1987.
13. Гринштейн Дж., Винниц М. Химия аминокислот и пептидов. М.: Мир, 1965
14. Шредер Э., Лгбок К. Пептиды, т. 1 и 2. М.: Мир, 1967
15. Общая органическая химия, в 12 т. М.: Химия, 1983, 1984. Т. 1, 4-7.
16. Кери Ф., Сандберг Р. Углубленный курс органической химии, в 2 т. М.: Химия, 1981. Т. 2.
- 17.Рохов Ю., Херд Д., Льюис Р. Химия металлоорганических соединений. М.: Издательский центр «Химия», 1963.
18. Шевердина Н.И., Кочешков К.И. Методы элементоорганической химии. Цинк, кадмий. М.: Наука, 1964.
19. Несмеянов А.Н., Соколик Р.А. Методы элементоорганической химии. Бор, алюминий, галлий, индий, таллий, в 2 т. М.: Наука, 1964.
20. Михайлов Б.М., Бубнов Ю.Н. Бороорганические соединения в органическом синтезе. М.: Наука, 1977.
21. Граймс Р. Карбораны. М.: Мир, 1974.
22. Андрианов К. А. Методы элементоорганической химии. Кремний. М.: Наука, 1968.
23. Нифантьев Э. Е. Химия фосфорорганических соединений. М.: Изд. МГУ, 1971.
24. Оаэ Сигеру. Химия органических соединений серы. М.: Мир, 1975.
25. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986.
26. Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного катализа. М.: Химия, 1979.
27. Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Координация и катализ. М.: Мир, 1980.
28. Экспериментальные методы исследования катализа/ Под ред. Р. Андерсона. М.: Мир, 1972.
29. Методы анализа поверхностей/ Под ред. А. Зандерна. М.: Мир, 1979.
30. Хартри Ф. Закрепленные металлокомплексы. М.: Мир, 1989.
31. Шилов А.Е., Шульпин Г.Б. Активация и каталитические реакции углеводородов. М.: Наука, 1995.
32. Лебедев Н.Н., Манаков М.Н., Швец В.Ф. Теория химических процессов основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1984.
33. Томас Ч. Промышленные каталитические процессы и эффективные катализаторы. М.: Мир, 1973.
34. Литература по разделу «Теория методов исследования вещества в химии»
- 34.1. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978.
- 34.2. 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.
- 34.3. Сергеев Н. М. ЯМР-спектроскопия: учеб. пособие для химиков-органиков / Н. М. Сергеев. - [М.] : Изд-во Моск. ун-та, 1981. - 278 с.
- 34.4. 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.
35. Литература по разделу «Хемоинформатика»

- 35.1. Tutorials in Chemoinformatics / Ed. Alexandre Varnek - Wiley-VCH. 2017, 482 p. ISBN: 978-1-119-13796-2
- 35.2. 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>)

