



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Химия элементоорганических соединений

основная образовательная программа подготовки аспиранта
по направлению 04.06.01 Химические науки

Уровень высшего образования
подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

Квалификация: Исследователь.
Преподаватель-исследователь.

Иркутск 2015

Рабочая программа составлена на основании федеральных государственных образовательных стандартов к основной образовательной программе высшего образования подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 04.06.01 Химические науки

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Ученого совета ИрИХ СО РАН протокол № 5 от 19 мая 2015 г.

Зав. аспирантурой к.х.н.



Т.Н. Комарова

1. Цели и задачи учебной дисциплины

Рассматриваемая дисциплина является обязательной в подготовке аспирантов, обучающихся по профилю 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

Целью изучения дисциплины является 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 ООП

2.1. Учебная дисциплина Б1.В.ОД.1 «Химия элементоорганических соединений» входит в вариативную часть междисциплинарного профессионального модуля ООП.

2.2. Данная программа строится на преемственности программ в системе высшего образования и предназначена для аспирантов ИрИХ СО РАН, прошедших обучение по программе подготовки магистров или специалистов, прослушавших соответствующие курсы и имея по ним положительные оценки. Она основывается на положениях, отраженных учебных программах указанных уровней. Для освоения дисциплины «Химия элементоорганических соединений» требуются знания и умения, приобретенные обучающимися в результате освоения ряда дисциплин (разделов дисциплин), таких как:

- Теоретические основы органической химии,
- Физико-химические методы исследования структуры веществ,
- Основы стереохимии
- Органическая химия,
- Физическая химия
- Механизмы органических реакций
- Применение спектроскопии ЯМР для изучения структуры элементоорганических соединений
- Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной

2.3. Дисциплина «Химия элементоорганических соединений» необходима при подготовке выпускной квалификационной работы аспиранта и подготовке к сдаче кандидатского экзамена.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины «Химия элементоорганических соединений» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Универсальные компетенции

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);
- способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).

Общепрофессиональные компетенции

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);
- готовностью к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

Профессиональные компетенции:

- углубленное знание теоретических и методологических основ химии элементоорганических соединений, умение работать с аппаратурой и приборами, предназначенными для исследований элементоорганических веществ (ПК-1);
- способность ставить и решать инновационные задачи в области химии элементоорганических соединений, связанные с получением элементоорганических веществ, их практическим применением, определением строения и реакционной способности с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний (ПК-2);
- умение проводить анализ и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике, владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, органической химии (ПК-3);
- умение применять физико-химические методы исследования структуры для изучения структуры элементоорганических соединений, знание основ квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества (ПК-4).

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).

4.1. Структура дисциплины

№	Наименование дисциплины	Объем учебной работы, ч							Вид итогового контроля
		Всего	Всего аудиторн.	Из аудиторных				Самост. работа	
				Лекц	Лаб	Практ	КСР		
1	Химия элементо-органических соединений	216	108	108	-	-	-	108	Зачет

4.2. Содержание дисциплины

4.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№	Наименование разделов и тем	Виды учебной работы и трудоемкость, ч						Формы текущего контроля успеваемости
		Всего	Лекц.	Лаб	Практ	СР	КСР	
1	Теоретические представления о природе химических связей и электронном строении элементоорганических соединений.	43	22	-	-	21	-	Устный групповой опрос
2	Реакционная способность	43	21	-	-	22	-	Устный групповой опрос, решение

	элементоорганических соединений.							задач
3	Физические методы исследования структуры и электронного строения ЭОС.	44	22	-	-	22	-	Устный групповой опрос, решение задач
4	Органические производные непереходных элементов.	43	22	-	-	21	-	Устный групповой опрос, решение задач
5	Органические производные переходных металлов.	43	21	-	-	22	-	Устный групповой опрос
Всего часов:		216	108	-	-	108	-	

4.2.2 Содержание разделов и тем дисциплины

№	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Формы проведения занятий
1	Теоретические представления о природе химических связей и электронном строении элементо-органических соединений.	1. Классификация и номенклатура элементоорганических соединений (ЭОС). 2. Теоретические методы моделирования структуры и электронного строения молекул. Природа и классификация химических связей в ЭОС. 3. Метод молекулярных орбиталей (МО) как основа анализа электронного строения ЭОС. 4. Концепция ароматичности в ЭОС.	Лекции, семинары, самостоятельная работа
2	Реакционная способность элементо-органических соединений.	1. Классификация основных типов реакций и реагентов с участием ЭОС. 2. Превращения лигандов в координационной сфере металлов. 3. Окислительно-восстановительные превращения металлоорганических соединений. 4. Различия в строении и свойствах ЭОС в газовой, жидкой и твердой фазах. 5. СН-кислотность ЭОС.	Лекции, семинары, самостоятельная работа
3	Физические методы исследования структуры и электронного строения ЭОС	1. ЯМР-спектроскопия в исследовании строения и реакционной способности ЭОС. 2. Масс-спектрометрия ЭОС. Физические и теоретические основы метода. 3. Метод рентгеноструктурного анализа (РСА), фото- (ФЭС) и рентгенофотоэлектронной (ЭСХА) спектроскопии. 4. Оптическая спектроскопия (ИК, УФ, КР). 5. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).	Лекции, семинары, самостоятельная работа
4	Органические производные непереходных элементов	1. Органические производные щелочных металлов (I группа). 2. Органические производные элементов II группы. 3. Органические производные элементов XII	Лекции, семинары, самостоятельная работа

		группы. 4. Органические производные элементов III группы. 5. Органические производные элементов XIII группы. 6. Органические производные элементов XIV группы. 7. Органические производные элементов XV группы.	
5	Органические производные переходных металлов	1. Классификация металлоорганических соединений переходных металлов по типу лигандов, координированных с металлом. 2. Карбонильные комплексы переходных металлов. 3. Гидридные комплексы переходных металлов.	Лекции, семинары, самостоятельная работа

5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции, семинары и практические работы.
2. Сопровождение лекций визуальными материалами в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий, проецируемых на экран с помощью видеопроектора.
3. Проведение практических работ в лабораториях, участие обучающихся в научной работе и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и Интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов.

Виды самостоятельной работы:

в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

7. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Цель контроля - получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

7.1. Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляемая на протяжении семестра. Текущий контроль знаний учащихся организован как устный групповой опрос (УГО).

Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, и развитие практических умений аспиранта.

7.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация осуществляется в конце семестра и завершает изучение дисциплины «Химия элементоорганических соединений». Форма аттестации – зачет.

Контрольные вопросы к зачету:

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 полиэдров 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, радикалофилы, 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 металлоорганических соединений.

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. 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 свинцееорганические 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 двоевязанности 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 карбониллов металлов. Методы синтеза, строение и реакции. Карбонилат анионы, карбонил галогениды, карбонилгидриды. Природа связи металл-карбонил.

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

Практическое применение карбониллов 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 C), депротонирование связей C-H. Роль карбеновых комплексов в катализе(метатезис олефинов). Использование в тонком органическом синтезе. Реакция Делца. 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 металлом. Циклобутadiенжелезотрикарбонил. Роль олефиновых комплексов в катализе.

Ацетиленовые комплексы.

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

Аллильные комплексы.

Типы аллильных 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. Аренохромтрикарбонильные 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 металлоорганических соединений переходных металлов.

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

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

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: эпоксицирование, катализируемое переходными металлами. Получение ацетальдегида и винилацетата из этилена.

Аллильное алкилирование CH_3 -, NH_2 - и OH -органических соединений в условиях металлокомплексного катализа. Моно-, ди- и полидентатные лиганды. Хиральные лиганды и асимметрический синтез.

Метатезис олефинов и ацетиленов. Реакция кросс-сочетания.

Основные представления биометаллоорганической 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.

7.3. Итоговая аттестация

Форма аттестации – кандидатский экзамен в устной форме. Кандидатский экзамен проводится по окончании обучения в аспирантуре.

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 металлоорганических 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. Аллюминийорганические соединения: синтез, свойства, реакции. Катализаторы Циглера-Натта. Применение аллюминийорганических соединений в промышленности и органическом синтезе.

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

Билет 8

1. Классификация элементорганических соединений. Основные этапы развития химии элементорганических 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 элементорганических соединений.

Билет 9

1. Концепция ароматичности в химии элементорганических соединений. Примеры металлоорганических 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 элементорганических соединений.

Билет 10

1. Природа химических связей в элементорганических 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 элементорганических соединений.

Билет 11

1. Теоретические основы стереохимии элементорганических 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 элементорганических соединений.

Билет 12

1. Основные типы реагентов (электрофилы, нуклеофилы, карбеноиды и др.) в химии элементорганических 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 элементорганических 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 металлоорганических 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 В₁₂, строение и биологические функции. Применение металлоорганических соединений в медицине.

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

Кандидатский экзамен проводится в присутствии не менее 2 членов экзаменационной комиссии из состава, утвержденного приказом по ИрИХ СО РАН, в устном или письменном виде с последующим устным собеседованием по вопросам, указанным в экзаменационном билете. На подготовку ответов в письменном виде отводится 1 академический час.

Критерии оценивания ответа аспиранта в ходе государственного экзамена

«Отлично»	Минимум 3 вопроса билета (из 3) имеют полные ответы. Содержание ответов свидетельствует об отличных знаниях выпускника и о его умении решать профессиональные задачи, соответствующие его будущей квалификации.
«Хорошо»	Минимум 2 вопроса билета (из 3) имеют полные ответы. Содержание ответов свидетельствует о хороших знаниях выпускника и о его умении решать профессиональные задачи, соответствующие его будущей квалификации.
«Удовлетворительно»	Минимум 1 вопрос билета (из 3) имеет полный и правильный ответ, 2 вопроса раскрыты не полностью. Содержание ответов свидетельствует о недостаточных, но удовлетворительных знаниях выпускника и о его ограниченном умении решать профессиональные задачи.
«Неудовлетворительно»	Три вопроса билета (из трех) не имеют ответа. Содержание ответов свидетельствует об отсутствии знаний выпускника и о его неумении решать профессиональные задачи.

8. 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 биокomпозиты / 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. 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.

Интернет-ресурсы

Доступ к электронным научным информационным ресурсам осуществляется через сервер Центральной научной библиотеки Иркутского научного центра:

1. <http://pubs.acs.org/> - Журналы American Chemical Society (ACS), American Physical Society (APS)
2. <http://www.sciencemag.org/> - American Association for the Advancement of Science (AAAS)
3. <http://www.nature.com/> - Журнал Nature
4. <http://www.tandfonline.com/> - Журналы издательства Taylor&Francis
5. <http://www.sciencedirect.com/> - Журналы издательства Elsevier – Freedom Collection
6. <http://link.springer.com/> - Журналы издательства Springer
7. <http://www.springerprotocols.com/> - Журналы издательства Springer Journals и SpringerProtocols
8. <http://www.interscience.wiley.com> - Журналы издательства Wiley
9. <http://apps.webofknowledge.com/> -База данных Web of Science
10. <http://www.scopus.com/> - База данных SCOPUS

9. Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины

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

Основу материально-технической базы института составляют два цифровых мультядерных 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, tandemный 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 имеется вычислительный кластер 39Гц/112Гб/14Тб и необходимое программное обеспечение (GAUSSIAN, GAMESS, DALTON и DIRAC).

Автор-составитель рабочей программы дисциплины: д.х.н., доцент Розенцвейг И. Б.