

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

ЗАТВЕРДЖЕНО
Вченою радою
Хіміко-технологічного факультету
Протокол № 2 від 27 лютого 2017 р.



Голова вченої ради Г.М.Астрелін

ПРОГРАМА

комплексного фахового випробування для вступу на освітньо-професійну
програму підготовки магістра
спеціальності 161 Хімічні технології та інженерія
по спеціалізації «Хімічні технології органічних речовин»

Програму рекомендовано кафедрою
Органічної хімії та технології органічних
речовин
Протокол № 7 від "14" лютого 2017 р.

Завідувач кафедри А.А. Фокін

ВСТУП

Програма вступного іспиту за напрямом підготовки спеціалістів та магістрів по спеціалізації «Хімічні технології органічних речовин» базується на дисциплінах учбового плану та робочого учбового плану підготовки бакалаврів за спеціальністю 161 «Хімічні технології та інженерія».

В основі програми лежить комплекс запитань з основних учбових дисциплін, що повністю відповідають вимогам професійної підготовки.

Програма вміщує наступні розділи:

1. Симетрія в хімії.
2. Молекулярна спектроскопія.
3. Стереохімія органічних сполук.
4. Теорія хіміко-технологічних процесів.
5. Спектральні методи дослідження органічних сполук.

З усіх курсів («Симетрія в хімії», «Молекулярна спектроскопія» «Стереохімія органічних сполук», «Теорія хіміко-технологічних процесів» та «Спектральні методи дослідження органічних сполук») програма містить перелік теоретичних запитань, які необхідно вивчити для виконання Комплексного фахового випробування.

Комплексне фахове випробування проводиться у письмовій формі, його тривалість – 180 хвилин без перерви. Екзаменаційний білет містить 10 (десять) задач, по дві з кожного з перерахованих вище курсів. Приклад екзаменаційного білета наведений у кінці програми. Задачі можуть видозмінюватися у межах робочої навчальної програми відповідного кредитного модулю і дещо відрізнятись від наведених у даній Програмі, залишаючись за складністю на такому ж рівні.

1. ЗМІСТ ПРОГРАМИ

Симетрія в хімії

Поняття симетрії, визначення симетрії. Роль симетрії в хімії. Математичний апарат симетрії. Загальні відомості про матриці. Лінійні операції над матрицями. Детермінанти та їх обчислення. Спеціальні матриці.

Вектор, його напрямок та довжина. Лінійні операції над векторами. Прямокутна система координат. Скалярний та векторний добуток векторів. Перетворення прямокутних координат на площині. Перетворення прямокутних координат у просторі. Матриці переходів. Кути Ейлера.

Система координат. Поняття про елемент та операцію симетрії. Тотожне перетворення. Поворотна вісь, поворотні осі кінцевого та нескінченного порядку. Центр інверсії та дзеркальна площина. Дзеркально-поворотна (невласна) вісь. Теореми взаємодії елементів симетрії. Номенклатура в симетрії. Символіка Шонфліса та значення символів.

Кратні операції симетрії. Групи симетрії як розділ теорії груп. Група, порядок групи. Поняття особливої точки. Точкові групи. Таблиці множення. Квадрат Келі. Генератори та підгрупи. Добуток груп. Класи груп. Властивості класів.

Найпростіші точкові групи симетрії C_i , C_s . Циклічні точкові групи C_n , C_{nv} та C_{nh} . Дієдральні точкові групи D_n , D_{nd} та D_{nh} . Особливі точкові групи $C_{\infty v}$ та $D_{\infty h}$. Точкові групи вищої симетрії T , T_d , T_h , O , O_h , I , I_h . Симетрія атомних орбіталей.

Визначення точкової групи симетрії. Алгоритм визначення точкової групи симетрії. Приклади молекул, що відносяться до різних груп симетрії.

Матрична форма запису операцій симетрії. Поняття про базис. Матричний запис перетворень симетрії в довільному базисі. Ізоморфізм та гомоморфізм груп симетрії.

Представлення та характери кінцевих груп. Поняття про представлення, які приводяться та які не приводяться. Приведення представлень. Лема Шура. Представлення циклічних груп та побудова їх таблиць характерів.

Невироджені та вироджені за симетрією представлення. Представлення, які не приводяться та таблиці характерів. Побудова та використання таблиць характерів для опису симетричних властивостей молекули. Символи Малікена.

Симетрія та антисиметрія. Хіральність як властивість симетрії. Енантіомери. Полярність молекул та симетрія. Групові орбіталі. Представлення груп через базис атомних орбіталей. Перетворення подібності. Загальна концепція ортогональності.

Співвідношення ортогональності у представленнях, які не приводяться. Велика теорема ортогональності Вігнера та її застосування. Визначення та властивості проєкційних операторів. Адаптовані за симетрією лінійні комбінації атомних орбіталей.

Молекулярна спектроскопія

Поняття електромагнітного випромінювання, визначення електромагнітної хвилі. Квантування енергії. Електромагнітний спектр та спектральні області. Походження спектрів. Принципи класичної теорії випромінювання, поглинання та розсіювання випромінювання. Квантово-механічні основи походження спектрів. Наближення Борна-Опенгеймера. Принципова схема спектрометра. Реєстрація спектрів.

Поняття про мікрохвильову спектроскопію Обертання молекул. Обертання та оберտальна енергія двохатомних молекул. Класична модель жорсткого ротатора. Квантово-механічна модель жорсткого ротатора. Заселеність рівнів та інтенсивність ліній електромагнітного спектру.

Тепловий розподіл Больцмана. Виродження енергетичних станів. Вплив ізотопного заміщення на мікрохвильовий спектр. Нежорсткий ротатор та його спектр. Багатоатомні лінійні молекули. Молекули типу симетричного ротора та їх мікрохвильовий спектр. Молекули типу асиметричного ротора. Застосування мікрохвильової спектроскопії для визначення геометричної будови молекул. Ефект Штарка та його застосування.

Інфрачервона спектроскопія. Коливання окремого тіла. Коливання двохатомної молекули. Простий гармонічний осцилятор. Ангармонічний осцилятор. Обертони. Коливально-оберտальні переходи у двохатомній молекулі. Коливально-оберտальний спектр оксиду вуглецю. Порушення принципу Борна-Опенгеймера: взаємодія обертань та коливань. Коливання багатоатомних молекул.

Основи теорії нормальних коливань. Симетрія нормальних коливань та правила відбору. Число нормальних коливань різних типів симетрії. Правила відбору для спектрів ІЧ-поглинання. Обертони і комбіновані частоти. Резонанс Фермі. Вплив обертання на багатоатомні молекули. Лінійні молекули: паралельні та перпендикулярні коливання. Вплив ядерного спіну. Молекули типу симетричного та асиметричного ротора. Застосування інфрачервоної спектроскопії.

Спектроскопія комбінаційного розсіювання світла та її модель. Релеївське, стоксове та антистоксове розсіювання. Поляризованість молекул. Оберտальні спектри комбінаційного розсіювання для лінійних молекул. Оберտальні спектри комбінаційного розсіювання для молекул типу симетричного ротора та молекул інших типів. Коливальні спектри КРС та правила відбору для них. Активність коливань в комбінаційному розсіюванні. Обертони та комбіновані частоти.

Поляризація в спектрах КРС. Природа поляризованого світла та ступінь деполіризації. Коливання молекул типу симетричного ротора. Узагальнення на інші типи молекул. Визначення структури молекул за даними ІЧ-спектроскопії та спектроскопії КРС.

Електронні спектри двохатомних молекул. Груба коливальна структура: прогресії. Інтенсивність коливальних спектрів: принцип Франка-Кондона. Енергія дисоціації та продукти розпаду. Оберտальна тонка структура електронно-коливальних переходів. Правила відбору. Діаграма Фортра. Предисоціація. Двохатомні молекули: висновки.

Електронні стани молекул. Збудження та симетрія. Електронні переходи. Їх типи. Збуджені стани та спектри люмінесценції. Синглетні та триплетні збуджені стани молекул. Діаграма Яблонського.

Стереохімія органічних сполук

Стереохімічні особливості атому вуглецю і основні стереохімічні явища. Конформація. Конфігурація Діастереомери. Енантіомери. Стереохімічна номенклатура.

Загальні методи одержання стереоізомерів. Синтези на основі природних оптично активних сполук. Розщеплення рацематів. Кінетичне розщеплення.

Визначення просторової конфігурації. Визначення конфігурації π -діастереомерів, σ -діастереомерів та енантіомерів. Хімічна кореляція, фізичні методи, метод оптичного порівняння, хіроптичні методи.

Стереохімія алканів та їх похідних. Насичені ациклічні молекули з полярними замісниками або ланками. Аномерний ефект.

Стереохімія циклоалканів та їх похідних. Встановлення конфігурації заміщених циклічних сполук. Методи, які ґрунтуються на симетрії, фізичних та хімічних властивостях. Кореляційні методи. Стійкість циклічних молекул. Легкість циклізації, як функція розмірів циклу. Ефект Торпа-Інгольда, правила Болдуїна.

Стереохімія сполук із кратними вуглець-вуглецевими зв'язками. Алкени, циклоалкени, циклооктатетраєни, кумулени.

Стереохімія аренів та гетероаренів. Похідні біфенілу та їх аналоги. Циклофани та анса-сполуки. Геліцени та спіральні фенантрени. Анулени.

Стереохімія азоту. Оксими, азометини. Оптично активні похідні азоту. Амідни та їх аналоги. Гідроксамові кислоти та їх аналоги.

Стереохімія гетероциклів. Піперидин, гідровані хіноліни, тропан, оксирани, тетрагідрофуран та гетероцикли з двома атомами кисню.

Стереохімія елементарноорганічних сполук. Похідні кремнію. Концепція псевдообертання, Похідні фосфору, сірки, сполуки бору.

Стереохімія природних сполук. Вуглеводи. Амінокислоти, пептиди, білки, нуклеїнові кислоти.

Основи конформаційного аналізу. Конформації ациклічних молекул. Фізичні та спектральні властивості діастереомерів і конформерів. Конформації та реакційна здатність. Рівняння Уінстейна-Холнеса, принцип Кертіна-Гамета.

Конформаційна поведінка циклічних сполук. Циклогексан та його похідні. Конформації, фізичні властивості і реакційна здатність.

Хіроптичні властивості. Оптична активність та анізотропна рефракція. Дисперсія оптичного обертання. Застосування дисперсії оптичного обертання і кругового дихроїзму. Встановлення конфігурації і конформації. Класифікація хромофорів. Правила спіральності.

Індуковані дисперсія оптичного обертання і круговий дихроїзм. Круговий дихроїзм хіральних полімерів. Застосування оптичної активності. Поляриметрія. Емпіричні правила і кореляції. Розрахунок оптичного обертання. Коливальна оптична активність.

Теорія хіміко-технологічних процесів

Основні типи реакцій нуклеофільного заміщення у відповідності до типу субстрату та нуклеофілу. Механізм прямого заміщення. Експериментальні докази реалізації механізму S_N2 . Іонізаційний механізм. Роль розчинника. Схема Уінстейна та її експериментальні докази. Об'єднаний механізм іонних пар S_N1 .

Перегрупування карбокатионів. Неопентильне перегрупування та перегрупування Вагнера-Мейєрвейна. Фактори, які впливають на легкість реакції. Перегрупування Дем'янова і Тіффено (реакції аліфатичних амінів під дією азотистої кислоти). Скелетні перегрупування карбокатионів, які містять гідроксильну групу в α -положенні. Дієнон-фенольне перегрупування.

Участь π - і σ -зв'язків в анхімерному сприянні реакції нуклеофільного заміщення. Некласичні карбокатиони. Проблема норборнільного карбокатиону.

Анхімерне сприяння сусідніх груп в реакціях нуклеофільного заміщення. Перегрупування Фаворського (перегрупування α -галогенкетонів в присутності основ). Схема механізму S_N1 .

Скелетні перегрупування карбенів. Перегрупування Вольфа, синтез Арндта-Ейстера. Гомологізація альдегідів і кетонів.

Перегрупування за участю нітренив. Перегрупування Гофмана, Курціуса, Лосеня та Шмідта. Перегрупування Бекмана та Вагнера-Мейєрвейна.

Схема механізму елімінування $E1cB$. Орієнтація $C=C$ зв'язку. Правило Бредта. Правила Зайцева і Гофмана. Фактори, які впливають на легкість елімінування.

Реакції фрагментації. Основні типи механізмів за Гробом. Франгомерний ефект. Фрагментація похідних адамантану.

Термічне (піролітичне) елімінування. Шестицентровий механізм. Реакція Чугаєва (піроліз ксантогенатів). Одержання ксантогенатів, механізм, стереохімія реакції. П'ятицентровий механізм. Реакція Коупа та її особливості. Стереохімія реакції на прикладі похідних циклогексану.

Реакції електрофільного приєднання до $C=C$ зв'язку. Загальна схема механізму. Стереохімія реакції. Циклічний іон бромонію та експериментальні докази його існування. Схема бромовання норборнену.

Реакція Сімонса-Сміта. Схема механізму, стереохімія і препаративні аспекти. Реакції гідроксимеркурування. Схема механізму і стереохімія на прикладі похідних циклогексену.

Епоксидування олефінів надкислотами. Схема механізму. Стереохімія. Особливості епоксидування α,β -ненасичених кетонів. Епоксидування олефінів в відсутності кислого середовища.

Нуклеофільне приєднання до карбонільної групи. Приєднання синільної кислоти, азотистих основ та спиртів.

Альдольна конденсація. Кислотний та лужний каталіз. Аелювання за Робінсоном. Конденсація Дарзана. Конденсації Кляйзена і Дікмана.

Концепція ароматичності. Анулени. Ароматичність в заряджених циклах. Конденсовані ароматичні системи. Гомоароматичність.

Схема механізму ароматичного електрофільного заміщення. Зв'язок між структурою та реакційною здатністю. Нітрування. Галогенування. Алкілування та ацилювання за Фріделем-Крафтом та споріднені реакції. Електрофільне заміщення інших груп, крім водню. *Inco*-атака.

Стійкі вільні радикали. Структура та просторова будова радикальних інтермедіатів. Кінетичні особливості ланцюгових реакцій.

Реакції вільно-радикального заміщення. Галогенування, окиснення, заміщення за участю арильних радикалів. Внутрішньомолекулярні вільно-радикальні реакції. Реакція Гофмана-Лефлера. Реакції фрагментації радикалів.

Реакції вільно-радикального приєднання. Приєднання галогеноводнів, галогенметанів, меркаптанів та інших вуглеводневих радикалів.

Спектральні методи дослідження органічних сполук

Спектр електромагнітних коливань. Типи спектральних досліджень і відповідні їм діапазони електромагнітних хвиль. Електронні спектри поглинання. Закони поглинання світла. Блок-схема спектрометра для вимірювання УФ та видимих спектрів.

Основні хромофори. Термінологія, пов'язана з смугами поглинання. Поглинання випромінювання алканами, алкенами та дієнами, насиченими сполуками, що містять гетероатоми. Поглинання випромінювання карбонільними сполуками.

Правила Вудворда-Фізера. Спектри ароматичних сполук. Застосування електронної спектроскопії: кількісний аналіз сумішей, встановлення будови сполук, визначення молекулярної маси сполуки.

Інфрачервона спектроскопія, основні поняття. Типи коливань. Фактори, що визначають кількість, положення та інтенсивність смуг поглинання в ІЧ спектрі. Блок-схема ІЧ спектрометра. Техніка вимірювання спектрів. ІЧ спектри алканів, алкенів, аренів. ІЧ спектри гідроксилвмісних сполук, карбонільних сполук, карбонових кислот та їх похідних, азот- та сірковмісних речовин. Застосування ІЧ спектроскопії.

Спектроскопія комбінаційного розсіяння світла (КРС). Фізичні основи, апаратне оформлення, особливості та можливості КРС-спектроскопії. Знайомство з спектрофотометрами для УФ, видимої та ІЧ ділянок спектру.

Фізичні основи мас-спектрометрії. Методи іонізації молекул (електронний удар, фотоіонізація, іонізація полем, лазерна десорбція, бомбардування швидкими атомами, електроспрей-іонізація та хімічна іонізація). Блок-схема мас-спектрометра електронного удару (система напуску, іонне джерело, прискорювач, електростатичний сепаратор, магнітний аналізатор, система реєстрації спектру).

Типи іонів, що реєструються мас-спектрометром. Методи розділення іонів (одно- та подвійне фокусування, квадрупольні сепаратори, час-пролітні сепаратори. Роздільна здатність мас-спектрометра.

Визначення бруто-формули за спектрами низької та високої роздільної здатності. Особливості мас-спектрів різних класів органічних сполук (алкани, алкени, ароматичні вуглеводні, спирти, галогенопохідні вуглеводнів, етери, кетони, естери, аміни, амід).

Азотне правило, парно-електронне правило. Закономірності появи молекулярних, фрагментних та перегрупованих іонів. Хроматомас-спектрометрія. Знайомство з газо-рідинним хроматографом з мас-селективним детектором.

Ядерний магнітний резонанс. Магнітні властивості атомних ядер. Поведінка протона в магнітному полі. Розщеплення рівнів енергії. Макроскопічна намагніченість. Умови поглинання ядрами радіочастотного випромінювання. Хімічне зміщення. Механізми екранування магнітних ядер. Залежність величини хімічного зміщення від структури молекули.

Спін-спінове розщеплення сигналів поглинання. Структурні фактори, що визначають величину константи спін-спінового розщеплення. Хімічна та магнітна еквівалентність ядер. Спектри першого та вищих порядків. Релаксація спінів. Повздожня та поперечна релаксації. Ядерний ефект Оверхаузера. Методи декаплінгу ядерних спінів. Прилади для вимірювання ЯМР.

Інтерпретація спектрів ЯМР. Зміст спектру ЯМР на ядрах ^1H . Кореляції будови структурних фрагментів молекул з хімічними зсувами в спектрах на ядрах ^1H . Кореляції структурних фрагментів з виглядом сигналів в спектрі ПМР.

Аналіз спектру чистої сполуки з не співпадаючими сигналами. Аналіз спектру сполуки що має домішки. Аналіз складних спектрів ПМР. Кореляція хімічних зсувів ядер ^{13}C зі структурою молекули. Аналіз вуглецевого спектру сполуки.

Перенесення поляризації. Послідовність DEPT. Редагування спектрів за допомогою DEPT. Генерація двомірних спектрів. COSY-спектри. Методики засновані на ЯЕО. Спектроскопія NOESY-2D. Гетероядерна кореляційна

спектроскопія. Гетероядерна багатоквантова кореляція НМҚС. Гетероядерна багатозв'язана кореляція НМВС. Спільне використання методів НМҚС/НМВС. Особливості використання спектроскопії ЯМР на ядрах ^{19}F та ^{31}P .

ПРИКІНЦЕВІ ПОЛОЖЕННЯ

Як допоміжний матеріал на екзамені дозволяється використовувати таблиці характеристик точкових груп симетрії, таблиці фізичних констант, необхідні для вирішення спектральних задач та таблиці спектральних даних. Повна збірка таблиць спектральних даних знаходиться у книзі: Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных / Э.Преч, Ф.Бюльманн, К.Аффольтер. – Пер. с англ. – М.: Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 438 с.: ил. – (Методы в химии). Решту таблиць надає кафедра. Будь-якими іншими джерелами інформації користуватися під час Комплексного фахового випробування забороняється.

Кожна з десяти задач екзаменаційного білету оцінюються у 10 балів. Отже максимально кожний вступник може набрати 100 балів.

Критерії оцінювання завдань екзаменаційного білету.

- 10-9 балів: «*відмінно*» – безпомилкове вирішення усіх розрахункових вправ при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних знань з хімії при вирішенні контрольних завдань;
- 8-7 балів: «*добре*» – вирішення усіх розрахункових вправ з незначними, непринциповими помилками (в т.ч. математичного характеру); наявність 1-2 помилок та 1-2 зауважень щодо вміння застосовувати фундаментальні знання з хімії при вирішенні контрольних завдань;
- 6-5 балів: «*задовільно*» – вирішення усіх розрахункових вправ з двома – трьома досить суттєвими помилками; наявність суттєвих зауважень до теоретичних викладок, помилки у формулах;
- 0 балів: відповідь принципово невірна або відсутня.

Для отримання студентом відповідних оцінок (ECTS – European Credit Transfer System – Європейської кредитно-трансферної та акумулюючої системи – та традиційних) його оцінка переводиться згідно з таблицею:

Бали за Комплексне вступне випробування RD	Оцінка ECTS	Традиційна оцінка
$0,95R \leq RD$: 95...100	A – Відмінно	Відмінно
$0,85R \leq RD < 0,95R$: 85...94	B – Дуже добре	Добре
$0,75R \leq RD < 0,85R$: 75...84	C – Добре	
$0,65R \leq RD < 0,75R$: 65...74	D – Задовільно	Задовільно
$0,6R \leq RD < 0,65R$: 60...64	E – Достатньо	
$RD < 0,6R$: <60	F_x – Незадовільно	Незадовільно

Виходячи з цього:

- “5” – 95 – 100 балів (0,95-1,00);
- “4,5” – 85 – 94 бали (0,85-0,94);
- “4” – 75 – 84 бали (0,75-0,84);
- “3,5” – 65 – 74 бали (0,65-0,74)
- “3” – 60 – 74 бали (0,6-0,64);

менш ніж 0,60 - студент отримує “Незадовільно” без права перездачі.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Э.Илиел, С.Вайлен, М. Дойл. Основы органической стереохимии. М. Бином, 2007.
2. Ш. Бакстон, С. Робертс, Введение в стереохимию органических соединений. М., «Мир», 2005.
3. В.М. Потапов. Стереохимия. М.»Химия», 1988.
4. В.О. Ковтуненко Загальна стереохімія. Київ, 2009.
5. М. Ногради. Стереохимия. М. «Мир», 1984.
6. Г. Джаффе, М. Орчин. Симметрия в химии. М. «Мир», 1967.
7. И.С. Дмитриев. Симметрия в мире молекул. Л. «Химия», 1976.
8. И. Харгиттаи, М. Харгиттаи. Симметрия глазами химика. М. «Мир», 1989.
9. Д. Шрайвер, П. Эткинс. Неорганическая химия. Т. 1. М. «Мир», 2004. Глава 4.
10. Р. Хохштрассер. Молекулярные аспекты симметрии. М. «Мир», 1968.
11. Р. Фларри. Группы симметрии. Теория и химические приложения. М. «Мир», 1983.
12. Р. Драго. Физические методы в химии. В 2-х т. Т.1. М.»Мир», 1981.
13. Д. Марч. Органическая химия. Т1-4. М. «Мир», 1989.

14. Ф. Кери, Р. Садберг. Углубленный курс органической химии. Т.1-2. М. «Химия». 1981.
15. П. Сайкс. Механизмы реакций в органической химии. М. «Химия». 1989.
16. Р. Маки, Д. Смит. Путеводитель по органическому синтезу. М. «Мир», 1985.
17. В. Смит, А. Бочков, Р. Кейпл. Органический синтез. Наука и искусство. М. «Мир», 2001.
18. E.J. Corey, X.-M. Cheng. The Logic of Chemical Synthesis. John Wiley&Sons, New York, 1989.
19. П. Ласло. Логика органического синтеза. Т.т 1-2. М. «Мир», 1998.
20. Т. Джилкрист. Химия гетероциклических соединений. М. «Мир», 1996.
21. R. Larock. Comprehensive Organic Transformations. A Guide to Functional Group Preparation. VCH, 1989.
22. Н. Хоф. Classics in Hydrocarbon Chemistry. Willey-VCH. 2000.
23. Дж. Коллмен, Л. Хигедас, Дж. Нортон, Р. Финке. Металлорганическая химия переходных металлов. Т.т.1-2, М. «Мир», 1989.
24. Joule J.A., Mills K., Heterocyclic Chemistry, A John Wiley & Sons, Ltd., Publ. 2010.
25. Quin L.D., Tyrell J.A., Fundamentals of Heterocyclic Chemistry: Importance in Nature and in the Synthesis of Pharmaceuticals. A John Wiley & Sons, Ltd., Publ. 2010.
26. Katritzky A.R., J. M. Lagowski J.M. Handbook of Heterocyclic Chemistry. Elsevier, 2010.
27. Дж. Джоуль, К. Миллс, Химия гетероциклических соединений. М. «Мир», 2004.
28. Титце Л., Айхер Т. Препаративная органическая химия. М. «Мир», 2004.
29. Мальцев, А. А. Молекулярная спектроскопия. [Текст] / А. А. Мальцев. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1980. – 272 с.
30. Бенуэлл, К. Основы молекулярной спектроскопии. [Текст] / К. Бенуэлл. – М.: Мир, 1985, – 384 с.

Розробники програми:

Канд. хім. наук, доц. _____	Родіонов В.М.
Канд. хім. наук, ст.викл. _____	Кушко А.О.
Канд. хім. наук, ст.викл. _____	Клімко Ю.Є

ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ № 1

1. Для даної структури навести усі можливі стереоізомери, вказати точкову групу симетрії та наявність/відсутність хіральності. Вказати порядок кожної точкової групи та перелічити операції симетрії, які входять у неї.

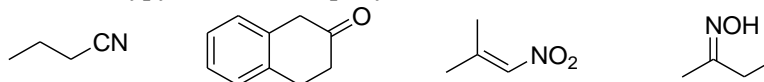


2. Для точкової групи симетрії четвертого порядку з попередньої задачі запропонувати матричне представлення і, використовуючи це представлення, побудувати таблицю характеристик цієї точкової групи і визначити, за яким представленням перетворюються базисні функції $x, y, z, R_x, R_y, R_z, x^2+y^2, x^2-y^2, z^2, xy, xz, yz$.

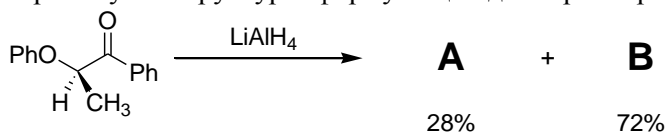
3. Обертальний спектр $^{19}\text{F} - ^{79}\text{Br}$ складається з еквідистантних окремих ліній, розташованих на відстані $0,71433 \text{ см}^{-1}$. Обчислити $B, I, r, \tilde{\nu}_{J=9 \rightarrow 10}$, а також визначити, який перехід буде найінтенсивнішим за температури 300 К.

4. Для молекули 1,2,3-трихлорбензолу визначити точкову групу симетрії, знайти число нормальних коливань та віднести їх до типів симетричних перетворень згідно з таблицею характеристик відповідної точкової групи симетрії. Визначити, нормальні коливання яких типів симетрії будуть активними в ІЧ-спектрі та в спектрі КРС.

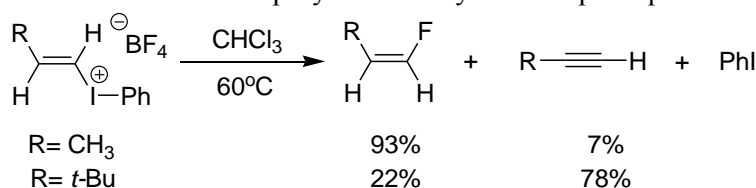
5. Які замісники або групи є енантіо- та діастереотопними у запропонованих сполуках? Використовуючи номенклатуру Хансона, спробуйте визначити їх.



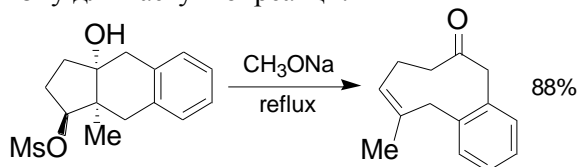
6. Реакція нуклеофільного приєднання до наведеної хіральної карбонільної сполуки привела до утворення двох діастереомерів з відповідним співвідношенням. Використовуючи необхідні стереохімічні моделі, запропонуйте структурні формули цих діастереомерів. Відповідь поясніть.



7. За допомогою схем механізмів поясніть результат наступного перетворення:



8. Запропонуйте схему механізму для наступної реакції:



9. В інфрачервоному спектрі розчину спостерігаються смуги поглинання при $3450, 3370$ та 1630 см^{-1} . Котрій із трьох сполук $\text{CH}_3(\text{C}=\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)_2$, $\text{CH}_3(\text{C}=\text{O})\text{NHCH}_3$ чи $\text{CH}_3(\text{C}=\text{O})\text{NH}_2$ відповідає цей спектр?

10. В спектрі ^1H ЯМР сполуки з бруто-формулою $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}_2$ спостерігаються такі сигнали: $\delta 1,0$ м.д. та $\delta 3,1$ м.д. із співвідношенням інтенсивностей $1 : 1$. Встановіть структуру речовини.

