

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Косенко Сергей Михайлович  
Должность: ректор  
Дата подписания: 22.06.2024 08:56:22  
Уникальный программный ключ:  
e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdcf836

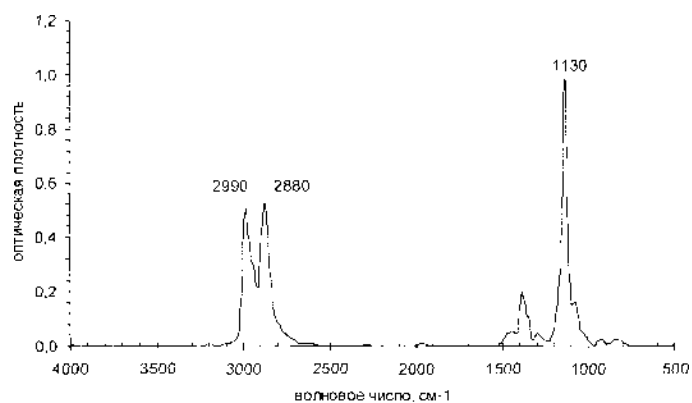
## Оценочные материалы для промежуточной аттестации по дисциплине

### Строение вещества

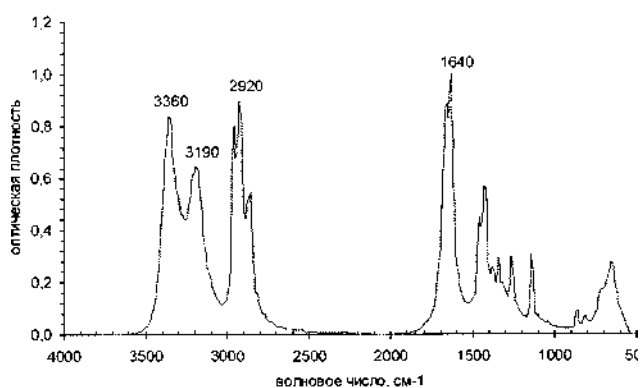
Код, направление подготовки	<b>04.03.01 ХИМИЯ</b>
Направленность (профиль)	<b>Инфохимия</b>
Форма обучения	<b>очная</b>
Кафедра-разработчик	<b>кафедра химии</b>
Выпускающая кафедра	<b>кафедра химии</b>

### Примеры задач к контрольным работам

1. В спектрах ЭПР радикала содержится три линии с соотношением интенсивностей 1 : 2 : 1 при 330,2; 332,5 и 334,8 мТл. Какова константа сверхтонкого расщепления? Сколько эквивалентных протонов содержит данный радикал?
2. Частоты в колебательном спектре  $^{39}\text{K}^{35,5}\text{C1}$  расположены на  $85,8 \cdot 10^{11}$ ,  $85,5 \cdot 10^{11}$  и  $85,2 \cdot 10^{11}$  Гц. Определите силовую постоянную и энергию диссоциации связи К-С1.
3. Спектр поглощения молекулы  $\text{SO}_2$  имеет  $\epsilon_{\text{max}} = 250$  л моль $^{-1}$  см $^{-1}$ . Определите силу осциллятора и орбитальную природу электронного перехода, образующего данную полосу поглощения, если полуширина полосы поглощения равна 4900 см $^{-1}$ .
4. Образец содержит  $4 \cdot 10^{15}$  спинов при нуле градусов по шкале Цельсия. Чему равна относительная заселенность состояний  $\delta\text{N}/\text{N} = \text{N}_\beta - \text{N}_\alpha / \text{N}_\alpha + \text{N}_\beta$  и каждого из состояний в магнитном поле 0,3 мТл?
5. Определить показатель преломления уксусной кислоты ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ) для желтой линии натрия, если молярная рефракция на этой длине волны равна 12,72 см $^3$ /моль, а плотность уксусной кислоты равна 1,046 г/см $^3$ .
6. Показатель преломления бензола на длине волны 434 нм равен 1,5236. Какова поляризуемость молекулы на этой длине волны? Плотность равна 0,879 г/см $^3$ .
7. Два волновых числа в колебательном спектре испускания молекулы  $^1\text{H}^{19}\text{Br}$  соответствуют переходам  $\nu=1 \rightarrow \nu=0$  (2958,38 см $^{-1}$ ) и  $\nu=2 \rightarrow \nu=1$  (2778,25 см $^{-1}$ ). Определить энергию диссоциации и энергию нулевого кванта, если постоянная ангармоничности связи H-Br равна 0,012.
8. При изомеризации молекулы две группы протонов становятся эквивалентными. При низких температурах, когда взаимопревращения происходят медленно, одна группа протонов резонирует при  $\delta_1 = 4,0$  м.д., а другая – при  $\delta_2 = 5,2$  м.д. При какой скорости взаимопревращений два сигнала сольются в один, если спектрофотометр работает на частоте 60 МГц.
9. Какую структуру Вы можете предложить для соединения  $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ , исходя из его спектра, представленного на рис.?



10. Из анализа ИК-спектра, представленного на рис., предложите структуру соединения  $C_4H_9NO$ .

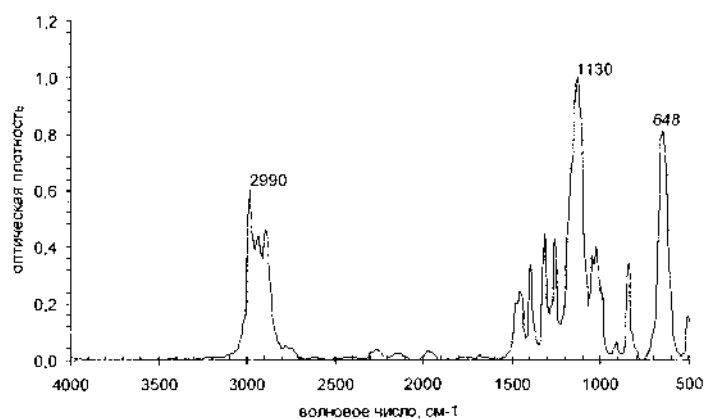


11. Соединение  $C_3H_7I$  в спектре ПМР содержит два сигнала: дублет при  $\delta$  1,9 м.д. (6H) и мультиплет при  $\delta$  4,3 м.д. (1H). Определите структуру вещества.

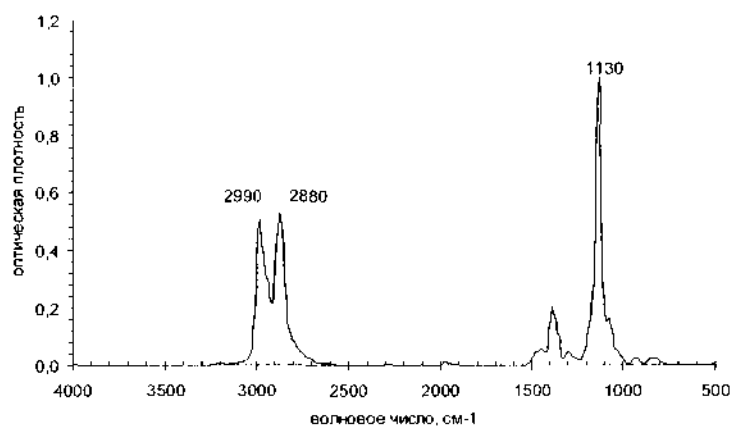
12. Какой из двух структур –  $CH_3C_6H_4OCH_2CH_3$  или  $C_6H_5CH_2OCH_2CH_3$  – отвечает спектр ПМР, содержащий триплет, квадруплет и два синглета при  $\delta$  1,0; 3,7; 4,6; и 7,3 м.д. соответственно.

13. В спектре ПМР смеси циклогексана, тетраметилсилана, хлороформа и бензола содержатся четыре пика при  $\delta$  0; 1,4; 7,2 и 7,4 м.д. (соотношение площадей 2:1:3,5:2,5). Определите какой сигнал относится к каждому веществу, а также количественный состав смеси.

14. Произведите отнесение полос поглощения в ИК-спектре хлорметилэтилэфира.



15. Какую структуру Вы можете предложить для соединения  $C_4H_{10}O$ , исходя из его спектра?



16. Углеводороду  $C_8H_{10}$  соответствует спектр ПМР, содержащий два синглетных сигнала при  $\delta$  2,1 и 7,2 м.д. с соотношением интенсивностей 3:2. Установите строение вещества.

17. Углеводород  $C_8H_{10}$  имеет следующий спектр ПМР ( $\delta$ , м.д.) : 1,15 (триплет); 2,8 (квадруплет); 7,15 (уширенный синглет); соотношение интенсивностей сигналов 3:2:5. Установите строение вещества.

18. Соединение  $C_3H_7I$  в спектре ПМР содержит два сигнала: дублет при  $\delta$  1,9 м.д. (6H) и мультиплет при  $\delta$  4,3 м.д. (1H). Определите структуру вещества.

19. Спектр ПМР соединения  $C_3H_6Br_2$  состоит из двух сигналов: триплет при  $\delta$  3,8 м.д. и квинтет при  $\delta$  2,2 м.д. (соотношение интенсивностей сигналов 2:1). Какова структура вещества?

20. Вещество  $C_6H_{10}O_4$  имеет следующий спектр ПМР ( $\delta$ , м.д.) : 1,25 (триплет) и 4,4 (квадруплет) с соотношением интенсивностей сигналов 3:2. Установите структуру вещества.

21. При гидратации непредельного углеводорода  $C_4H_8$  получен спирт, содержащий в спектре ПМР два синглета при  $\delta$  1,1 и 4,1 м.д. с соотношением интенсивностей 9:1. Напишите уравнение реакции.

## *Вопросы к экзамену*

1. Что такое теплота электрический дипольный момент? Единицы измерения.
2. Что такое поляризуемость молекулы? Какова природа поляризуемости? Единицы измерения.
3. Что такое поляризация диэлектрика?
4. Уравнение Дебая. Для каких молекул и для какой области шкалы электромагнитных волн правомерно применять это уравнение?
5. Уравнение Клаузиуса-Моссотти. Для каких молекул и в какой области шкалы электромагнитных волн правомерно применять это уравнение?
6. В чем суть 1 метода Дебая для определения дипольного момента и поляризуемости молекул? Границы его применения.
7. Современные методы определения дипольного момента молекул. Их преимущества и недостатки.
8. Можно ли перечисленными методами определить направление дипольного момента молекулы?
9. Какое из названных выше уравнений применимо для оптического диапазона спектра?
10. Поляризация диэлектрика при высоких частотах электромагнитного поля.
11. Что такое молярная рефракция? Как, пользуясь ею, можно найти показатель преломления вещества?
12. Как можно использовать в химии знание величины электрического дипольного момента?
13. Какие принципы квантовой механики лежат в основе спектральных методов исследования вещества?
14. В какой области шкалы электромагнитных волн расположены чисто вращательные спектры молекул?
15. Что такое приведенная масса? Чему равна приведенная масса двухатомной молекулы?
16. Поясните, что такое момент инерции и момент количества движения вращающегося тела? В каких единицах они измеряются?
17. Что такое сферический волчок? Приведите примеры молекул этого типа. Запишите квантованное выражение для энергии стационарного уровня сферического волчка. Каковы правила отбора для разрешенных переходов сферического волчка?
18. Что такое симметричный волчок? Приведите примеры молекул этого типа. Чему равна энергия стационарного уровня симметричного волчка? Каковы правила отбора для симметричного волчка?
19. Двухатомные и линейные молекулы. Чему равна энергия стационарного уровня двухатомной молекулы? Каковы правила отбора для разрешенных переходов в молекулах этого типа?
20. Каковы правила отбора для разрешенных переходов симметричного волчка?
21. Запишите выражения для вращательных постоянных. Какие структурные характеристики молекул позволяют можно определить из вращательных спектров?
22. В какой области шкалы электромагнитных волн расположены электронные спектры молекул?
23. Какими квантовыми числами принято характеризовать энергетические уровни электронной оболочки молекулы? Каковы правила отбора для разрешенных переходов в двухатомных молекулах?
24. В чем состоит принцип Франка-Кондона? Какие практические выводы из распределения интенсивности в электронно-колебательном спектре двухатомных молекул позволяет сделать знание этого принципа?
25. Закон Бугера-Ламберта-Бэра. Понятия молярного коэффициента поглощения, молярного коэффициента экстинкции, интегрального коэффициента поглощения, силы осциллятора электронного перехода.
26. Классификация электронных переходов по тину их орбитальной природы.

27. Как по величине молярного коэффициента экстинкции (силе осциллятора) можно предположительно определить тип электронного перехода, образующего полосу в электронном спектре поглощения?
28. Способы получения ИК-и КР- спектров.
29. В каком диапазоне частот электромагнитного поля проявляются колебания молекул?
30. Почему эти методы являются дополняющими друг друга?
31. Играет ли роль полярность молекул в получении спектров?
32. В каких спектрах более активны полярные молекулы? Почему?
33. Какие типы колебаний существуют?
34. Чем отличаются валентные колебания от деформационных?
35. Характеристические частоты. В чем их особенность?
36. В каких областях спектра Вы будете искать валентные колебания гидроксильного кислорода, карбонильного и эфирного?
37. В каких областях спектра проявляются одиночные, двойные, тройные С-С связи?
38. Что будет происходить со спектром при замещении атомов водорода на дейтерий?
39. Назовите возможности и ограничения этого метода.
40. Физические принципы, лежащие в получении ПМР-спектров.
41. В каком диапазоне частот электромагнитного поля проявляются ПМР-спектры?
42. Что такое химический сдвиг? В каких единицах принято его выражать?
43. Тетраметилсилан как эталон. Почему он используется при регистрации ПМР-спектров?
44. Чем обуславливается количество сигналов в спектре ПМР?
45. Что такое спин-спиновое взаимодействие? К чему оно приводит?
46. Назовите возможности и ограничения этого метода.

### Пример экзаменационного билета

1. Поясните, что такое момент инерции и момент количества движения вращающегося тела? В каких единицах они измеряются?
2. Соединение  $C_5H_{12}$  содержит в спектре ПМР единственный сигнал  $\delta$  0,82 м.д. Определите строение вещества.
3. Сколько сигналов и с каким соотношением интенсивностей содержит спектр ПМР 4-метилпентанон-2-ола-4  $(CH_3)_2C(OH)CH_2COCH_3$ ?