

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Общая характеристика физических методов исследования. Спектр электромагнитного излучения. Взаимодействие излучения с веществом. Классификация методов по областям электромагнитного излучения.

2. Рентгеноструктурный анализ – основной экспериментальный метод исследования кристаллов. Получение и взаимодействие рентгеновских лучей с веществом. Характеристическое и "белое" излучение. Селективные фильтры.

3. Во вращательном КР-спектре водорода наблюдаются линии со следующими смещениями  $\Delta\nu$  относительно возбуждающей линии: 354.38; 587.06; 814.41 и 1034.65  $\text{см}^{-1}$ . Рассчитайте вращательную постоянную  $B_0$ , момент инерции  $I_0$  и межъядерное расстояние  $r_0$ , пренебрегая эффектом центробежного растяжения.

$$c = 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}; h = 6.6256 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}; 1 \text{ а.е.м.} = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ кг.}$$

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор Киев

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 2

1. Физические основы явлений электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Условие ЭПР. g-фактор и его значение. Магнетон Бора. Эффект Зеемана. Спин-решеточная и спин-спиновая релаксация.

2. Кристаллы и их основные свойства. Симметрия кристаллов. Элементарная ячейка. Сингонии, типы центрировки, решетки Бравэ. Пространственные (федоровские) группы.

3. Во сколько раз упадет интенсивность исходного светового пучка, если он проходит через кювету с  $l = 1 \text{ мм}$ , содержащую 0.1 М раствора соединения. Его коэффициент экстинкции  $\epsilon_{\text{max}} = 10^4 \text{ дм}^3 \cdot \text{мол}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ .

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор Киев

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 3

1. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии с одним или несколькими ядрами. Константа сверхтонкого взаимодействия. Мультиплетность и распределение интенсивности спектра ЭПР. Основные параметры линии спектра ЭПР (интенсивность, ширина и форма линии,  $g$ -фактор).
2. Эффект Мессбауэра и условия его наблюдения. Ядерная изометрия. Энергия отдачи и доплеровское уширение. Энергия испускаемых и поглощаемых гамма- квантов.
3. Рассчитайте величины межплоскостных расстояний  $d$  и углов  $2\theta$  для 222 и 400 отражений, полученных на порошковой рентгенограмме кубического кристалла с параметром  $a=6.0 \text{ \AA}$  при съемке на  $\text{CuK}_\alpha$ -излучении ( $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ ).

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

*Книж*

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 4

1. Физические основы явлений ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Спин ядра. Условие ЯМР. Заселённость уровней энергии. Правила отбора.
2. Колебательные состояния молекул согласно классической теории. Колебания двухатомной молекулы. Гармонический и ангармонический осциллятор. Потенциал Морзе. Силовая постоянная молекулы. Нормальные колебания. Симметрия нормальных колебаний.
3. Параметр кубической ячейки  $\text{PuS} = 5.537 \text{ \AA}$ . На каких углах  $2\theta$  с использованием  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения ( $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ ) могут быть зарегистрированы следующие рефлексы: 111; 200; 220; 311; 222; 400; 331?

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

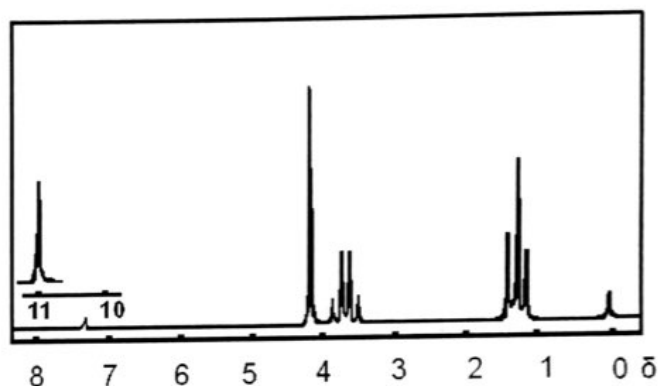
*Книж*

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 5

1. Тонкая структура спектров ЭПР. Крамерсовское расщепление в нулевом внешнем поле для анизотропных систем. Блок-схема ЭПР- спектрометра, особенности эксперимента.

2. Вращательные спектры многоатомных молекул. Молекулы типов линейного, симметричного, сферического и асимметричного волчков. Системы вращательных уровней энергии.

3. По спектру ПМР определить структуру соединения с брутто-формулой  $C_4H_8O_3$ .



Зав. кафедрой \_\_\_\_\_  
Экзаменатор Князь

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 6

1. Химический сдвиг в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер. Мультиплетная структура спектров ЯМР. Константы спин-спинового взаимодействия.

2. Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Классификация переходов по Малликену и Каша. Правила отбора и нарушения запрета.

3. Объясните общий вид спектра ЭПР ион-радикала тетраазанафталина  $C_6H_4N_4^{\cdot-}$ .



Зав. кафедрой \_\_\_\_\_  
Экзаменатор Князь

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 7

1. Получение мессбауэровских спектров и применение их в химии. Влияние химического окружения на эффект Мессбауэра. Химический (изомерный) сдвиг. Квадрупольные и магнитные взаимодействия.
2. Определение геометрических параметров молекул из микроволновых спектров. Методы наблюдения вращательных спектров. Правила отбора.
3. Спектр ПМР соединения ( $C_8H_{10}O$ ) представляет собой триплет, квадруплет и мультиплет с отношением интегральных интенсивностей 3:2:5 и химическими сдвигами 1,3; 4,0 и 7,1. Изобразите вид спектра и определите структуру молекулы.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_  
Экзаменатор Княз

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 8

1. Техника и методика эксперимента ЯМР. Блок-схема спектрометра ЯМР. Метод двойного резонанса. Двумерная спектроскопия ЯМР.
2. Принципы метода ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР). Ядерный квадруполь. Градиент электрического поля и его взаимодействие с ядром. Квадрупольные уровни энергии при аксиальной симметрии поля. Параметр асимметрии поля и уровни энергии.
3. В ИК-спектре поглощения молекулы HI наблюдается ряд колебательно-вращательных полос поглощения, интенсивность которых резко падает с возрастанием их волнового числа, т. е. наблюдаются полосы основного колебания и его обертона. Центры полос находятся при 2229.6; 4379.2; 6448.0 и 8434.7  $cm^{-1}$ . Проведите отнесение колебательных полос к соответствующим колебательным переходам и определите частоту колебания  $\omega_e$ , постоянную ангармоничности  $\omega_e x_e$  и силовую постоянную  $k_e$  молекулы HI.  
 $c = 3 \cdot 10^8$  м/с;  $h = 6.6256 \cdot 10^{-34}$  Дж·с; 1 а.е.м. =  $1.66 \cdot 10^{-27}$  кг.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_  
Экзаменатор Княз

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 9

1. Решение прямой колебательной задачи для многоатомных молекул. Нахождение силовых полей молекулы. Уравнения Лагранжа. Вековое уравнение.
2. Законы поглощения света. Способы изображения, условия получения и основные характеристики электронного спектра. Применение электронных спектров в качественном, структурном и количественном анализе.
3. Определить количество линий и соотношение их интенсивностей в спектре ЭПР радикалов  $\text{CH}_3^\bullet$ ,  $\text{CD}_3^\bullet$ ,  $\text{CCl}_3^\bullet$ . Ядра атомов  $^1\text{H}$ ,  $^2\text{D}$  и  $^{35}\text{Cl}$  имеют спины соответственно 1/2, 1 и 3/2.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор Княз

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 10

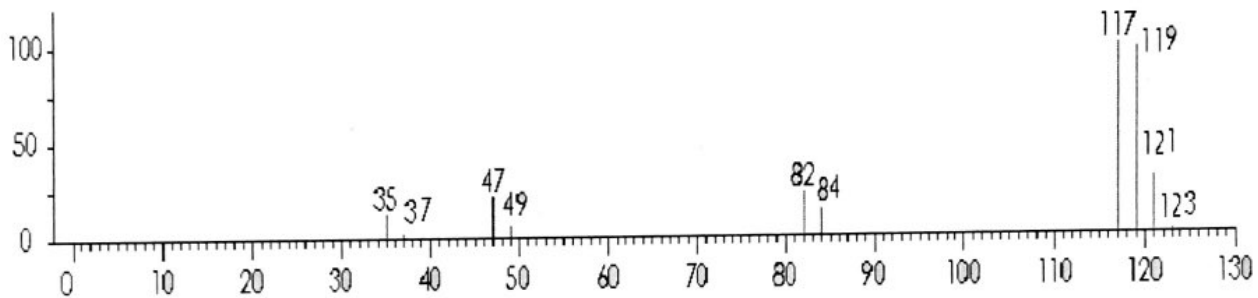
1. Вращательные спектры комбинационного рассеяния (КР). Схема эксперимента. Использование лазера. Условия получения и вид спектра. Правила отбора. Определение геометрических параметров неполярных молекул. Ограничение метода.
2. Принцип Франка-Кондона. Процессы в электронно-возбужденных состояниях. Флуоресценция и фосфоресценция. Работа лазера. Классификация лазеров.
3. При нитровании толуола получен продукт, спектр ПМР которого содержит два синглета с соотношением интенсивностей 2:3. Какова структура его молекулы?

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор Княз

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 11

1. Условия получения микроволнового спектра молекул. Системы вращательных уровней энергии. Энергетические переходы. Область частот. Интенсивность линий в спектрах.
2. Рентгенофазовый анализ. Индицирование рентгенограмм кристаллов. Число формульных единиц и рентгеновская плотность. Параметр Де-Вольфа.
3. Провести расшифровку масс-спектра тетрахлорида углерода. Сопоставить основные (максимальные по интенсивности) пики с фрагментами молекулы  $CCl_4$ .

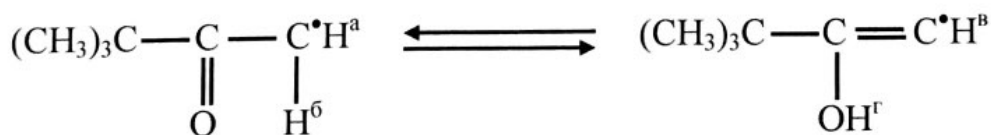


Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор Кн. Л.

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 12

1. Метод масс-спектрометрии. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, термическая ионизация, ионизация полем. Процессы фрагментации. Потенциал ионизации и потенциал появления иона.
2. Классификация электронных переходов. Концепция хромофоров и ауксохромов. Интенсивность полос различных переходов.
3. Соединение с общей формулой  $C_6H_{11}O$  в растворе присутствует в двух молекулярных формах с одинаковой концентрацией. Приведите спектр ЭПР



индивидуальных компонентов и суммарный спектр, если  $a(H^a) = a(H^b) = 2.3$  мТ;  $a(H^b) = 2.6$  мТ;  $a(H^{\gamma}) = 2.0$  мТ.  $B_0 = 332.5$  мТ,  $\nu_0 = 9.32$  ГГц. Каким образом можно определить: а) концентрации компонентов, б) энтальпию процесса превращения.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор Кн. Л.



ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 13

1. Метод фотоэлектронной спектроскопии. Химический сдвиг в ФЭС и его интерпретация. Техника и методика эксперимента.
2. Основы теории рассеяния рентгеновских лучей. Атомная и структурная амплитуда рассеяния. Схема четырехкружного дифрактометра. Основы высокотемпературной рентгенографии.
3. Во вращательном КР-спектре дейтероводорода (HD) наблюдаются линии со следующими смещениями относительно возбуждающей линии: 267.09; 443.08; 616.09 и 784.99  $\text{см}^{-1}$ . Рассчитайте вращательную постоянную  $B_0$ , момент инерции  $I_0$  и межъядерное расстояние  $r_0$ , пренебрегая эффектом центробежного растяжения.  
 $c = 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$ ;  $h = 6.6256 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}$ ;  $1 \text{ а.е.м.} = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$ .

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

*Кнез*

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 14

1. Уровни колебательной энергии двух- и <sup>мн</sup> многоатомных молекул. Коэффициент ангармоничности. Фундаментальные, обертоновые, составные и разностные частоты. Резонанс Ферми. Методы наблюдения колебательных спектров.
2. Принципиальная схема масс-спектрометра. Разрешающая сила масс-спектрометра. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр.
3. Объясните почему МБ-спектр  $\text{Na}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$  представляет одиночную линию, а спектр  $\text{Na}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]$  дублет. Какое соотношение интенсивностей пиков, чем его можно объяснить?

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

*Кнез*

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 15

1. Приложение метода ЯКР в химии и его возможности. Интенсивность, ширина, частота, и мультиплетность переходов в ЯКР. Примеры. Особенности эксперимента.
2. Правила отбора для колебательных и колебательно-вращательных спектров. Вращательная структура в колебательных ИК спектрах.
3. Определите строение молекулы общей формулы  $C_7H_{18}OSi$ , если в спектре ПМР наблюдаются два близлежащих синглета в области сильного поля.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

*Кн ез*

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 16

1. Применение масс-спектрометрии в химии. Идентификация вещества. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами.
2. Механизмы поглощения света кристаллами. Виды взаимодействия света с твердым телом.
3. Раствор соли трехвалентного ванадия  $V^{+3}$  дает сигнал в спектре ЭПР. Приведите общий вид спектра, если спин ядра  $I(V) = 7/2$ . Объясните возможную причину парамагнетизма частиц  $V^{+3}$ .

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

*Кн ез*



ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 17

1. Возможности применения эффекта Мессбауэра в химии и ограничения. Квадрупольное расщепление и изомерные сдвиги.
2. Индексы Миллера. Зависимость межплоскостных расстояний от симметрии и параметров решетки. Квазикристаллы.
3. Для метиловых эфиров бензойной и фенилуксусной кислот сняты УФ-спектры поглощения в области 220 – 350 нм. Для одного из веществ в спектре наблюдается максимум поглощения при  $\lambda_{\text{макс}} = 260$  нм ( $I_{\text{ге}} = 2.2$ ), а для другого при  $\lambda_{\text{макс}} = 285$  нм ( $I_{\text{ге}} = 3.1$ ). Какому веществу соответствует максимум поглощения при указанных длинах волн?

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

*Кнез*

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 18

1. Приложение метода ЭПР в химии. Изучение механизмов химических реакций. Стабилизация и определение свободных радикалов и других парамагнитных центров. Методы спиновых меток и спиновых ловушек. F и V- Центры. Строение радикалов в методе ЭПР.
2. Нормальные колебания многоатомных молекул. Типы нормальных колебаний на примере молекул  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{CO}_2$ . Концепция групповых частот.
3. Изобразите структуру ядерных энергетических уровней и качественный вид спектра ЯГР  $^{129}\text{I}$  при наличии квадрупольного расщепления ( $7/2 \rightarrow 5/2$ ).

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

*Кнез*

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 19

1. Применение методов рентгеновской фотоэлектронной и оже-спектроскопии в химии. Определение химических элементов и энергий связи электронов на внешних и внутренних оболочках атомов.
2. Техника и методики ИК и КР спектроскопии. Методы подготовки образцов. Прозрачные материалы. Фурье – спектроскопия. Типы интерферометров.
3. В ИК-спектре поглощения молекулы  $D^{37}Cl$  наблюдается ряд колебательно-вращательных полос поглощения, интенсивность которых резко падает с возрастанием их волновых чисел. Центры полос находятся при 2091.0; 4128.6 и 6112.8  $cm^{-1}$ . Проведите отнесение колебательных полос к соответствующим колебательным переходам  $\Delta v$  и определите частоту колебания  $\omega_e$ , постоянную ангармоничности  $\omega_e x_e$  и силовую постоянную  $k_e$  молекулы  $D^{37}Cl$ .  
 $c = 3 \cdot 10^8$  м/с;  $h = 6.6256 \cdot 10^{-34}$  Дж·с; 1 а.е.м. =  $1.66 \cdot 10^{-27}$  кг.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

*Кли...*

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 20

1. Применение масс-спектрометрии в химии. Проблема расшифровки масс-спектра. Определение молекулярных масс. Термодинамические исследования.
2. Приложение спектров ЯМР в химии. Изучение быстропротекающих процессов. Физико-химическое применение.
3. Изобразите спектр радикала  $\cdot CH_2-OH$ , если расстояние между пиками в дублете равно 0.12 мТ, а между центрами дублетов – 1.8 мТ.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

*Кли...*