



Washington, D.C. • USA



# Theoretical Problems

44th International  
Chemistry Olympiad  
July 26, 2012  
United States  
of America

# Зааварчилгаа

- Хуудас бүрт өөрийн нэр, кодоо бичнэ.
- Энэ даалгавар нь 8 бодлого, үелэх хүснэгт бүхий 49 хуудастай.
- Даалгаврыг гүйцэтгэх хугацаа 5 цаг болно. Зөвхөн ЭХЭЛ/START гэсэн команд өгөхөд ажлаа эхлүүлнэ.
- Өгсөн үзэг болон тооны машиныг хэрэглэнэ.
- Бүх тооцоо, үр дүн харгалзах нүдэнд бичигдсэн байна. Өөр хаа нэгэн газарт бичигдсэн зүйлд оноо өгөхгүй. Цаасны ар талыг шаардлагатай бол ноорог болгож хэрэглэнэ.
- Хэрэв шаардлагатай бол холбогдох тооцоог харгалзах нүдэнд бичнэ. Зөвхөн тооцоогоо харуулсан тохиолдолд зөв хариултад бүрэн оноо өгнө.
- Бодлогоо бодож дууссаны дараа өөрийн шалгалтын хуудсыг өгсөн дугтуйд хийнэ. Дугтуйг битүүмжилж наахгүй.
- **ЗОГС/STOP** команд өгөхөд та ажлаа дуусгах ёстой.
- Туслах багш зөвшөөрөл өгөх хүртэл өөрийн суудлаа орхиж явахгүй.
- Зөвхөн тодруулах зорилгоор албан ёсны англи хувилбарыг авч үзэж болно.

# Физик тогтмолууд, Томьёо, Тэгшитгэл

Авогадрийн тоо,  $N_A = 6.0221 \times 10^{23} \text{ моль}^{-1}$

Больцманы тогтмол,  $k_B = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ Ж}\cdot\text{К}^{-1}$

Хийн нийтлэг тогтмол,  $R = 8.3145 \text{ Ж}\cdot\text{К}^{-1}\cdot\text{моль}^{-1} = 0.08205 \text{ атм}\cdot\text{л}\cdot\text{К}^{-1}\cdot\text{моль}^{-1}$

Гэрлийн хурд,  $c = 2.9979 \times 10^8 \text{ м}\cdot\text{с}^{-1}$

Планкийн тогтмол,  $h = 6.6261 \times 10^{-34} \text{ Ж}\cdot\text{с}$

Электроны масс,  $m_e = 9.10938215 \times 10^{-31} \text{ кг}$

Стандарт даралт,  $P = 1 \text{ бар} = 10^5 \text{ Па}$

Агаарын даралт,  $P_{\text{atm}} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Па} = 760 \text{ мм м.у.б.} = 760 \text{ Торр}$

Цельсийн тэг хэм,  $273.15 \text{ К}$

1 нанометр ( $nm, nm$ ) =  $10^{-9} \text{ м}$

1 пикометр ( $pm, pm$ ) =  $10^{-12} \text{ м}$

Тойргийн тэгшитгэл,  $x^2 + y^2 = r^2$

Тойргийн талбай,  $\pi r^2$

Тойргийн периметр,  $2\pi r$

Бөмбөрцгийн эзэлхүүн,  $4\pi r^3/3$

Бөмбөрцгийн талбай,  $4\pi r^2$

Дифракцийн Браггийн хууль:  $\sin \theta = n\lambda/2d$

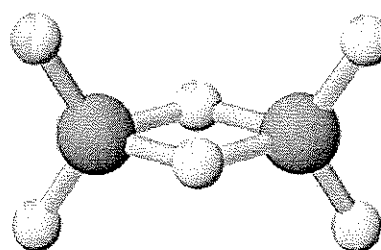
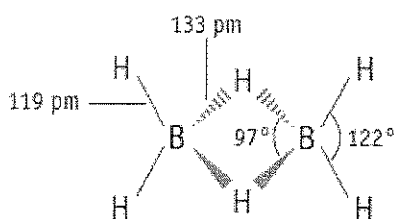


**БОДЛОГО 1****Нийт онооны 7.5%**

|     |      |       |   |    |           |      |
|-----|------|-------|---|----|-----------|------|
| a-i | a-ii | a-iii | b | c  | Бодлого 1 | 7.5% |
| 4   | 2    | 2     | 2 | 10 | 20        |      |
|     |      |       |   |    |           |      |

**а. Борын гидрид болон борын бусад нэгдлүүд**

Борын гидридийн химийг анх Альфред Сток (1876-1946) үндэслэсэн байна.  $B_xH_y$  гэсэн ерөнхий томъёотой 20 гаруй борын гидрид буюу бораны саармаг молекулыг тодорхойлжээ. Бораны хамгийн энгийн нэгдэлд диборан  $B_2H_6$  орно.



i. Доорхи өгөгдлүүдийг ашиглан борын гидридийн А ба В гэсэн бусад хоёр гишүүний жинхэнэ буюу молекуляр томъёог бич.

| Бодис | Төлөв (25 °C, 1 bar) | Борын массын хувь | Молекул масс (г/моль) |
|-------|----------------------|-------------------|-----------------------|
| А     | Шингэн               | 83.1              | 65.1                  |
| В     | Хатуу                | 88.5              | 122.2                 |

A = \_\_\_\_\_

B = \_\_\_\_\_

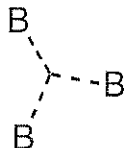
Name:

Code: MNG

ii. Уилям Липскомб “*Studies on the structures of boron hydrides illuminating the problems of chemical bonding*” бүтээлээрээ 1976 онд химийн салбарын Нобелийн шагнал хүртжээ. Тэрээр бүх борын гидрид дэх борын атом ердийн 2- электроноор нэгээс доошгүй H атомтай холбогдсон (B–H) байх ба бас янз бүрийн хэлбэрийн нэмэлт холбоо үүсэх тохиолдол гардагийг тогтоожээ. Эрдэмтэн Бораны бүтцийн энэхүү чанарыг тодорхойлох “*stux* тоо” хэмээх бүдүүвчийг бий болгожээ. “*stux* тоо”-ны *stux* гэдэг нь дараах ухагдахуунуудыг илэрхийлсэн үгийн эхний үсэг юм.

s = молекулд байгаа B–H–B гүүрний тоо

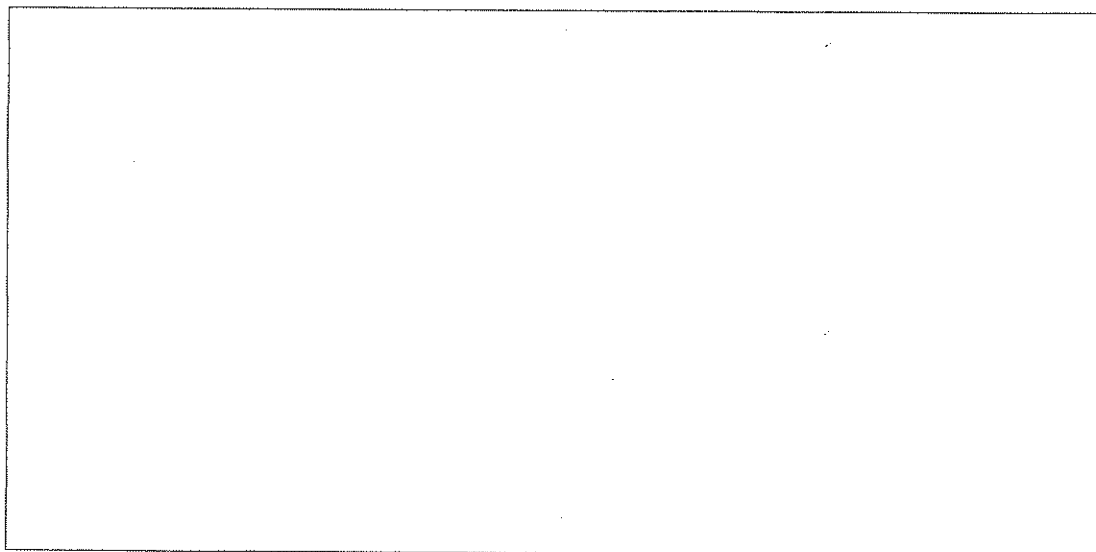
t = молекулд байгаа 3-н төвт BVB холбооны тоо



y = молекулд байгаа хоёр-төвт BB холбооны тоо

x = молекулд байгаа BH<sub>2</sub> бүлгийн тоо

B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>-ийн *stux* тоо нь 2002 байдаг. Тетраборан B<sub>4</sub>H<sub>10</sub>-ийн *stux* тоо нь 4012 байдаг бол үүнийг үндэслэн түүний байгуулалтын томъёог бич.



Name:

Code: MNG

iii. Бор дээр суурилсан сонирхолтой нэгдэл бол бор, нүүрстөрөгч, хлор ба хүчилтөрөгч агуулсан ( $B_4CCl_6O$ ) нэгдэл юм. Энэ бодисын молекулын спектрийг хэмжиж үзэхэд борын атом нь 1:3 гэсэн харьцаатай тетраэдр ба хавтгай гурвалжин геометрэн хоёр хэлбэрээр оршдогийг тодорхойлсон ба мөн спектр дээр CO-ийн гурвалсан холбооны шугам илэрсэн байна.  $B_4CCl_6O$  молекулын стереохимийн бүтцийг зурж харуул.

Бүтэц:

Name:

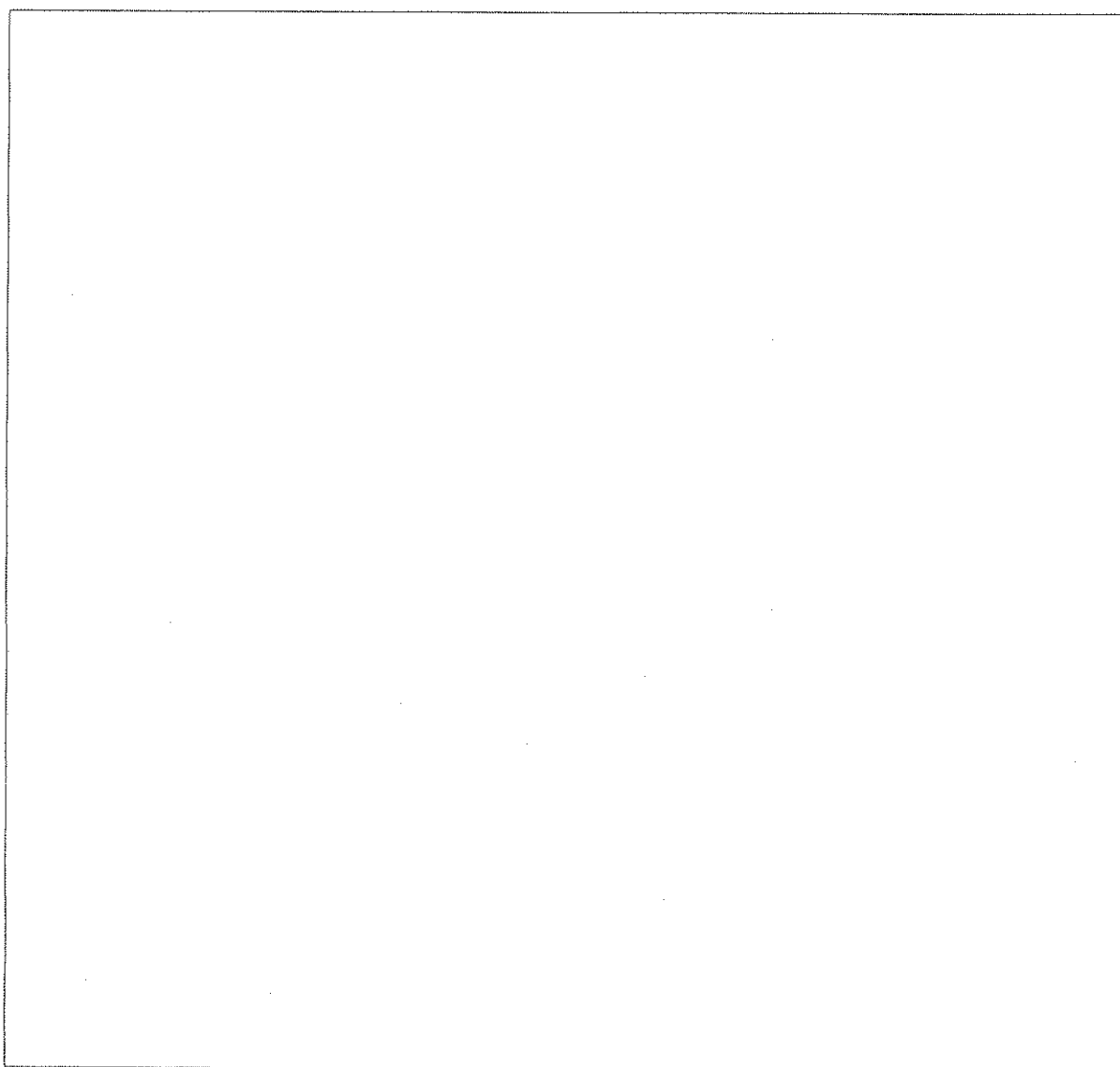
Code: MNG

**в. Борын нэгдлүүдийн термохими**

Доорхи өгөгдлүүдийг ашиглан  $B_2Cl_4$ (хий) дахь В-В дан холбооны задралын энтальпийг тооцоолно уу:

| Холбоо | Холбооны задралын энтальпи (кЖ/моль) |
|--------|--------------------------------------|
| B-Cl   | 443                                  |
| Cl-Cl  | 242                                  |

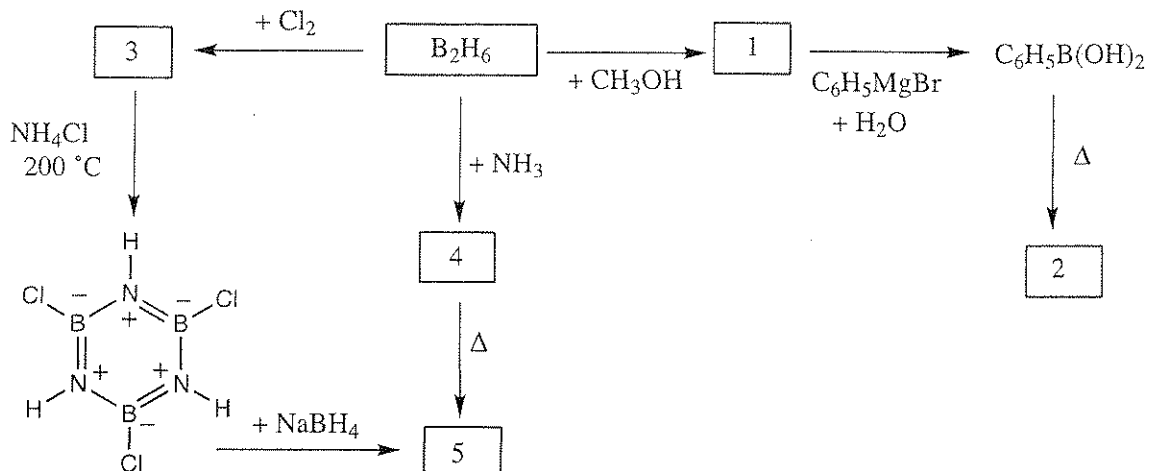
| Нэгдэл          | $\Delta_f H^\circ$ (кЖ/моль) |
|-----------------|------------------------------|
| $BCl_3$ (хий)   | -403                         |
| $B_2Cl_4$ (хий) | -489                         |





с. Дибораны хими

Доорхи бүдүүвчинд үзүүлсэн дугаарласан нэгдэл бүрийн байгуулалтын томъёог бичнэ үү. Дугаарласан нэгдэл бүр бор агуулсан нэгдлүүд болно.



ТЭМДЭГЛЭЛ:

- Нэгдэл "5"-ын буцлах температур  $55^\circ C$  болно.
- Бүх урвалд урвалжийг илүүдлээр авсан болно.
- $0.312g$  нэгдэл "2"-ыг  $25.0g$  бензолд уусгахад хөлдөх температурын бууралт  $0.205^\circ C$  байжээ. Бензолын хөлдөх температурын доошлолын тогтмол  $5.12^\circ C/\text{моляль}$ .

Name:

Code: MNG

| Дугаар | Нэгдлийн молекул бүтэц |
|--------|------------------------|
| 1      |                        |
| 2      |                        |
| 3      |                        |
| 4      |                        |
| 5      |                        |

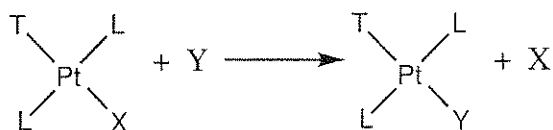
## БОДЛОГО 2

## Нийт онооны 7.8%

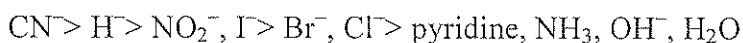
| a-i | a-ii | b-i | b-ii | c | Бодлого 2 | 7.8% |
|-----|------|-----|------|---|-----------|------|
| 4   | 4    | 6   | 1    | 5 | 20        |      |
|     |      |     |      |   |           |      |

Цагаан алт (II)-ны нэгдлүүд, Изомер ба транс эффект.

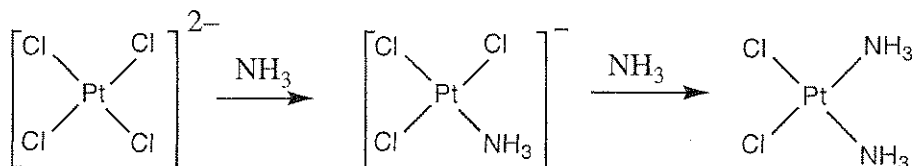
Цагааналт болон 10-р бүлгийн бусад металлууд хавтгай дөрвөлжин хэлбэрийн комплекс үүсгэдэг ба тэдгээрийн урвалын механизм сайн судлагджээ. Тухайлбал, тэдгээр комплексийн халалцах урвалаар стереохимиз хадгалан үлддэг.



Түүнчлэн лиганд X нь Y-ээр халалцах урвалын хурд нь X-ийн хувьд *транс* байрлалд байрших лиганд T-ын төрхөөс хамаардаг болох нь тодорхой болсон. Үүнийг *транс эффект* гэдэг. T нь доор өгөгдсөн ион юмуу молекулын аль нэг нь гэж үзвэл T-тэй харьцуулахад транс байрлалд оршиж байгаа лигандын халалцах урвалын хурд зүүнээс баруун тийш буурсан эгнээ үүсгэнэ.



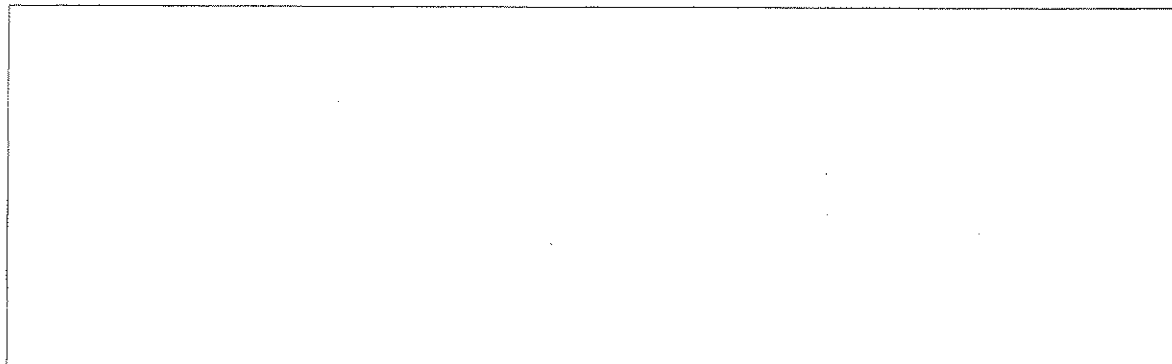
*Цис-* ба *транс-*  $\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2$  гарган авах процесс *транс* эффектээс хамаарна. Хорт хавдарын хими эмчилгээний нийтлэг нэр болсон цисплатин буюу цис изомерыг гарган авахын тулд  $\text{K}_2\text{PtCl}_4$ -г аммиактай урвалд оруулдаг байна.



Name:

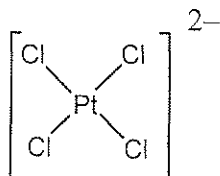
Code: MNG

i.  $\text{Pt}(\text{py})(\text{NH}_3)\text{BrCl}$  (py=пиридин,  $\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$ ). томъёотой цагааналт (II)-ны хавтгай дөрвөлжин нэгдлийн боломжтой бүх стерео изомеруудыг зурж харуул.

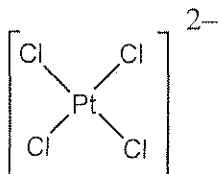


ii. Усан уусмал дахь  $\text{PtCl}_4^{2-}$ ,  $\text{NH}_3$ , and  $\text{NO}_2^-$  урвалжуудыг ашиглан  $[\text{Pt}(\text{NH}_3)(\text{NO}_2)\text{Cl}_2]^-$ -ийн стереоизомер тус бүрийг гарган авах урвалын бүдүүвчийг завсрын шатыг оролцуулан бичнэ үү. Энэ урвал кинетикийн хувьд *транс* эффектээр хянагддаг.

*цис*-изомер:

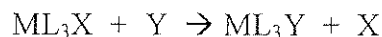


*транс*-изомер:

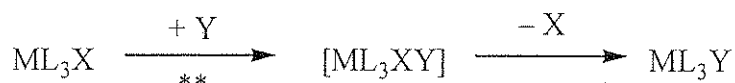


**б. Хавтгай дөрвөлжин комплексийн халалцах урвалын кинетик судалгаа**

Хавтгай квадрат комплекс дахь лиганд X нь Y-ээр халагдах процесс доор өгөгдсөн хоёр замын аль нэгээр, эсвэл хоёулангаар явагдаж болно:



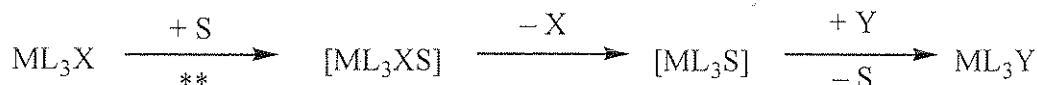
- *шууд халалцаа:* Орж ирж буй лиганд Y нь төвийн металитай нэгдэж таван координаттай комплексе үүсгээд түүнээс лиганд X эгшин зуур салж  $ML_3Y$  бүтээгдэхүүн үүснэ



\*\* = хурд тодорхойлогч шат, Хурдны тогтмол =  $k_Y$

- *Уусгагч оролцсон халалцаа:*

Уусгагчийн молекул S нь төвийн металитай нэгдэж  $ML_3XS$ -г үүсгээд түүнээс X хурдан салж  $ML_3S$  үүснэ. S эгшин зуур Y-тэй байраа сольж  $ML_3Y$  үүснэ.



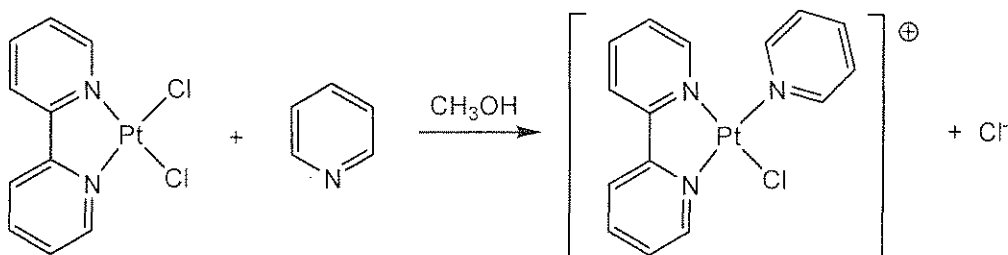
\*\* = хурд тодорхойлогч шат, Хурдны тогтмол =  $k_S$

Халалцах урвалын ерөнхий хурдны хууль:

$$\text{Хурд} = k_S[ML_3X] + k_Y[Y][ML_3X] \text{ болно.}$$

Хэрэв  $[Y] \gg [ML_3X]$ , байвал  $\text{Хурд} = k_{\text{obs}}[ML_3X]$ .

$k_S$  ба  $k_Y$  –ийн утга урвалжийн болон уусгагчийн шинж чанараас хамаарна. Жишээ нь, цагааналт (II)-ны хавтгай дөрвөлжин  $[ML_2X_2]$  комплекс дахь лиганд  $Cl^-$  нь пиридин ( $C_5H_5N$ )-ээр халагджээ.



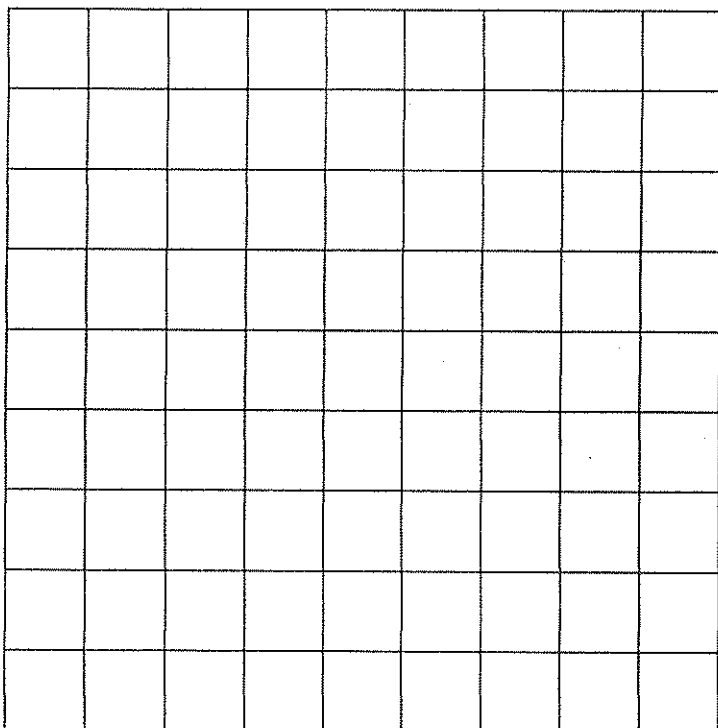
Name:

Code: MNG

25°C-т метанол дахь [пиридин]  $\gg$  цагаан алтны комплексийн концентраци нөхцөлтэй урвалын өгөгдлийг доор хүснэгтээр харуулав.

| Пиридины концентраци (моль/л) | $k_{\text{obs}}$ ( $\text{с}^{-1}$ ) |
|-------------------------------|--------------------------------------|
| 0.122                         | $7.20 \times 10^{-4}$                |
| 0.061                         | $3.45 \times 10^{-4}$                |
| 0.030                         | $1.75 \times 10^{-4}$                |

i.  $k_s$  ба  $k_y$ -ийн утгыг бодож олно уу. Тогтмол бүрийн нэгжийг нарийн гаргаж өгнө үү. Шаардлагатай бол дараах хавтгайг хэрэглэж болно.

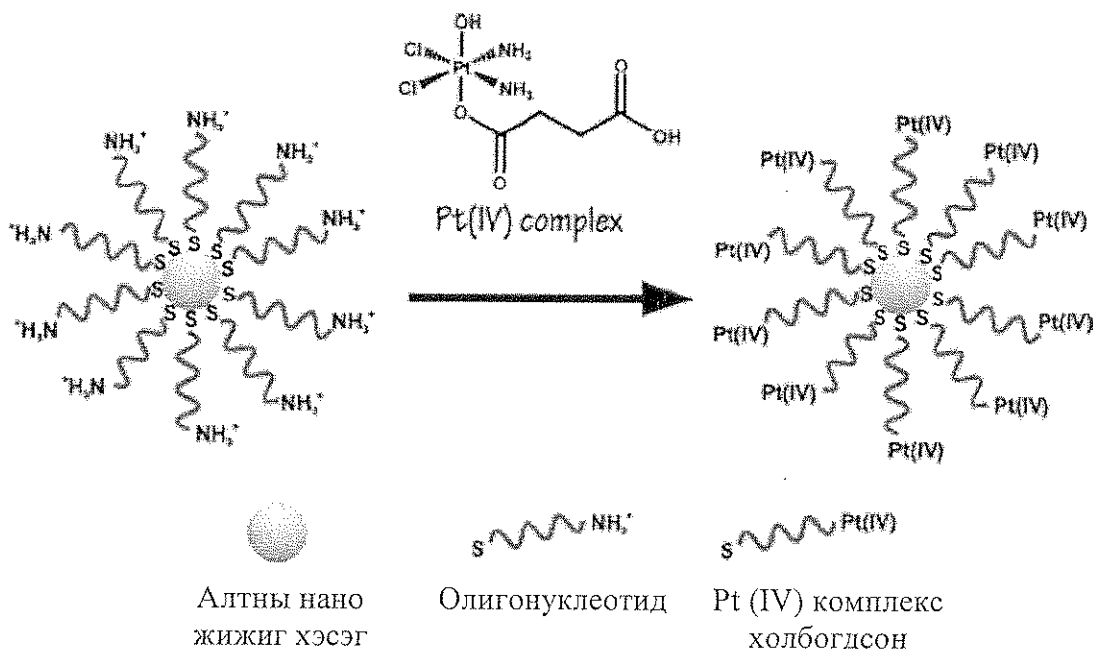


ii. Хэрэв [pyridine] = 0.10 моль/л бол доорхи хувилбаруудын аль нь зөв вэ? (Зөв хариултыг харгалзах нүхэн дотор чагтаар тэмдэглэ.)

|  |   |
|--|---|
|  | Уусгагч оролцсон халалцлалын ( $k_s$ ) замаар ихэнх пиридин бүтээгдэхүүн үүснэ.       |
|  | Шууд халалцах ( $k_y$ ) замаар ихэнх пиридин бүтээгдэхүүн үүснэ.                      |
|  | Хоёр замаар харьцуулах хэмжээний бүтээгдэхүүн үүснэ.                                  |
|  | Хоёр замаар гарган авсан бүтээгдэхүүний харьцангуй хэмжээг тогтоох боломжгүй хувилбар |

### с. Хемотерапи урвалж

Массачусетсийн Технологийн Институт (МТИ)-ийн профессор Липпардын баг цисплатиныг хавдрын эс рүү хамгийн ашигтайгаар хүргэхийн тулд цагааналт (IV)-ны комплекс болон олигонуклеотидыг нанохэмжээт алтан дээр суулгаж өгсөн.



13нм диаметртэй наноалт 90 олигонуклеотидын бүлгийг өөртөө татаж авдаг ба тэдгээрийн 98% нь Pt (IV)-ийн комплекстэй холбогддог болохыг судалгааны дүн харуулжээ. Хавдрын эсийг Pt (IV)-ийн нано жижиг хэсгийн урвалжаар ариутгахад хэрэглэсэн савны эзлэхүүн 1мл, тэр уусмалд  $1 \times 10^{-6}$  моль Pt агуулагдаж байсан гэж үзээд энэхүү туршилтанд хэрэглэсэн алтны болон цагааналтны массыг тооцоолно уу. (Алтны хувийн жин  $19.3\text{г}/\text{см}^3$ )

Name:

Code: **MNG**

**Цагааналтны масс**

**Алтны масс**

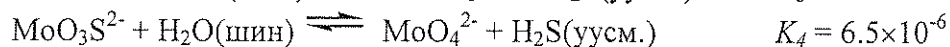
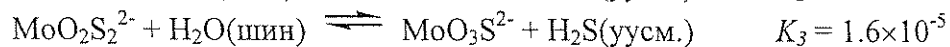
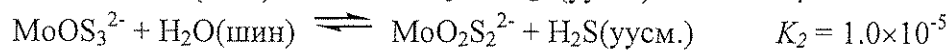
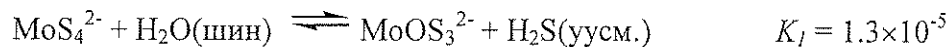


**БОДЛОГО 3****Нийт онооны 7.5 %**

| a | b  | c-i | c-ii | Бодлого 3 |      |
|---|----|-----|------|-----------|------|
| 4 | 12 | 6   | 12   | 34        | 7.5% |
|   |    |     |      |           |      |

Молибдат ион,  $\text{MoO}_4^{2-}$ -ын хүчилтөрөгчийн атом хүхрээр солигдох замаар тиомолибдат ион үүсдэг. Байгальд Хар тэнгис зэрэг гүнзгий усны гүнд биологийн гаралтай сульфат ион ангижирч  $\text{H}_2\text{S}$  хуримтлагдсан газарт тиомолибдат ион тохиолддог. Молибдат ион тиомолибдатад шилжсэнээр далай тэнгисийн гүнд ууссан молибдений хэмжээ багасч амьд организмд чухал микроэлементийн хомсдол бий болох сөрөг талтай.

Доорхи тэнцвэрүүд нь шингэрүүлсэн усан уусмал дахь молибдат болон тиомолибдат ионуудын харьцангуй концентрацыг зохицуулж байдаг.



а.  $1 \times 10^{-7}$  М-ийн  $\text{MoO}_4^{2-}$  ба  $1 \times 10^{-6}$  М-ийн  $\text{H}_2\text{S}$ (уусм.) агуулсан тэнцвэрт байгаа уусмалын  $\text{MoS}_4^{2-}$ -ийн концентрацийн утга хэд байх вэ?

Name:

Code: MNG

$\text{MoO}_2\text{S}_2^{2-}$ ,  $\text{MoOS}_3^{2-}$  болон  $\text{MoS}_4^{2-}$  агуулсан уусмалууд 395-468 нм долгионы урт бүхий үзэгдэх гэрлийн мужид гэрэл шингээлт өгөх ба  $\text{H}_2\text{S}$  зэрэг бусад ионууд өчүүхэн төдий гэрэл шингээлт өгнө. Эдгээр нэгдлүүдийн өгөгдсөн муж дахь гэрэл шингээлтийн коэффициентийн утгыг доорхи хүснэгтэнд үзүүлэв:

|                               | 468 нм дэх $\epsilon$<br>л моль <sup>-1</sup> см <sup>-1</sup> | 395 нм дэх $\epsilon$<br>л моль <sup>-1</sup> см <sup>-1</sup> |
|-------------------------------|--|--|
| $\text{MoS}_4^{2-}$           | 11870  | 120  |
| $\text{MoOS}_3^{2-}$          | 0  | 9030   |
| $\text{MoO}_2\text{S}_2^{2-}$ | 0  | 3230   |

в.  $\text{MoS}_4^{2-}$ ,  $\text{MoOS}_3^{2-}$  ба  $\text{MoO}_2\text{S}_2^{2-}$ -ийн хольц агуулсан, молибдений өөр нэгдэл агуулаагүй, тэнцвэр тогтоогүй уусмал өгөгджээ. Мо агуулсан жижиг хэсгийн нийлбэр концентраци  $6.0 \times 10^{-6}$  М, кюветийн зузаан 10.0 см, гэрэл шингээлт 486нм-д 0.365, 395-д 0.213 тус тус байжээ. Энэ холимог дахь Мо агуулсан гурван анионы концентрацийг тооцоол.

$\text{MoO}_2\text{S}_2^{2-}$ : \_\_\_\_\_

$\text{MoOS}_3^{2-}$ : \_\_\_\_\_

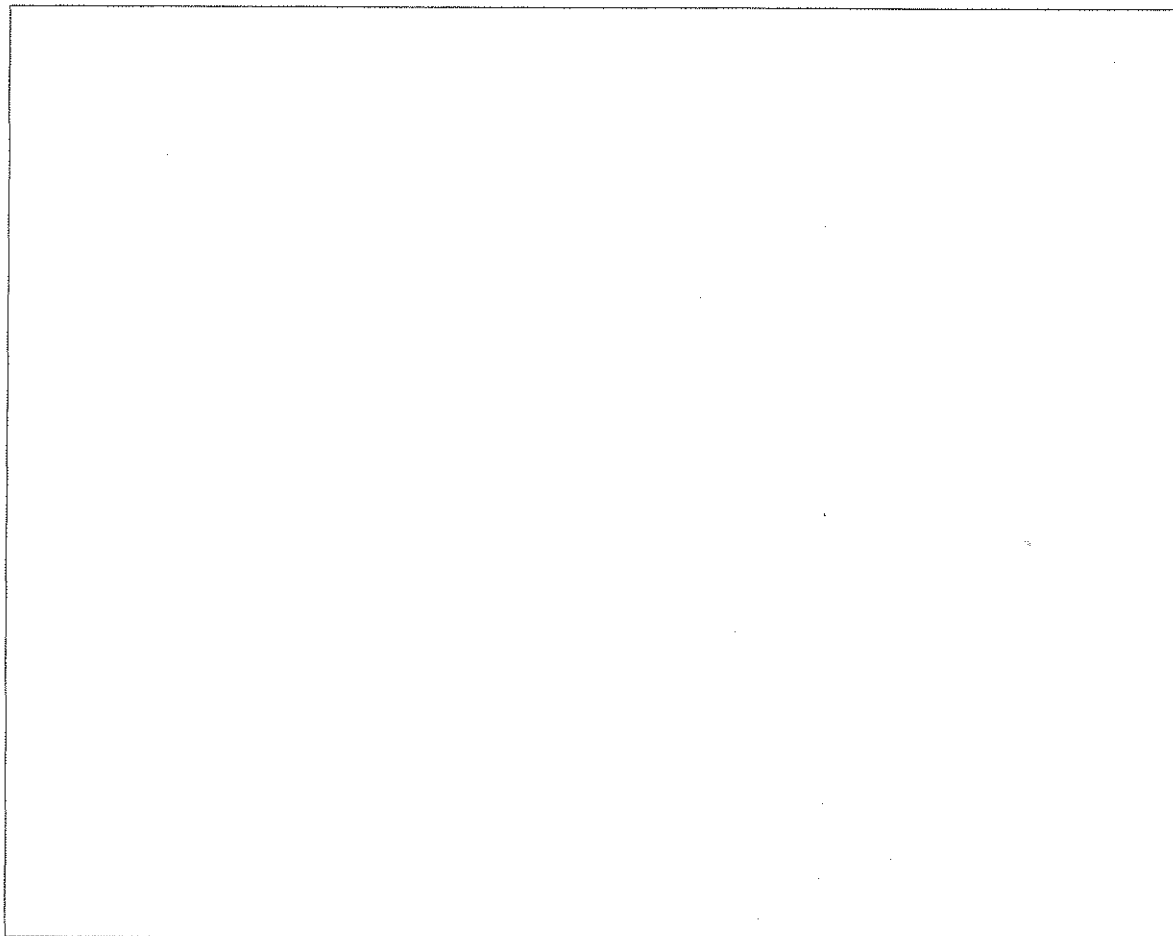
$\text{MoS}_4^{2-}$ : \_\_\_\_\_

Name:

Code: MNG

с. Анх  $2.0 \times 10^{-7} \text{M}$ -ийн  $\text{MoS}_4^{2-}$  агуулж байсан уусмал хаалтгай систем дотор гидролизд оржээ. Бүтээгдэхүүн болох  $\text{H}_2\text{S}$  хуримтлагдсаар системд тэнцвэр тогтсон байна. Тэнцвэр тогтсон төгсгөлийн шатан дахь  $\text{H}_2\text{S}$  болон молибден агуулсан бүх таван анионы тэнцвэрийн концентрацыг бодож ол. рН-ийн янз бүрийн орчинд  $\text{H}_2\text{S}$ -ээс  $\text{HS}^-$  үүсэх зэрэг боломжуудыг үл тооцно. *(онооны гуравны нэгийг тусгаар зургаан тэгшитгэлийг бичихэд өгөх ба гуравны хоёрыг концентрацийг зөв тодорхойлоход өгнө.)*

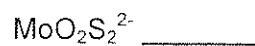
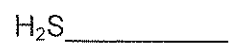
i. Системийг тодорхойлж байгаа зургаан тусгаар урвалын тэгшитгэлийг бич.



Name:

Code: MNG

ii. Боломжит ойролцоолол (хялбарчлал)-ыг хийгээд тэнцвэрт оролцож байгаа зургаан бодисын концентрацийг хоёр оронгийн нарийвчлалтайгаар тооцоол.



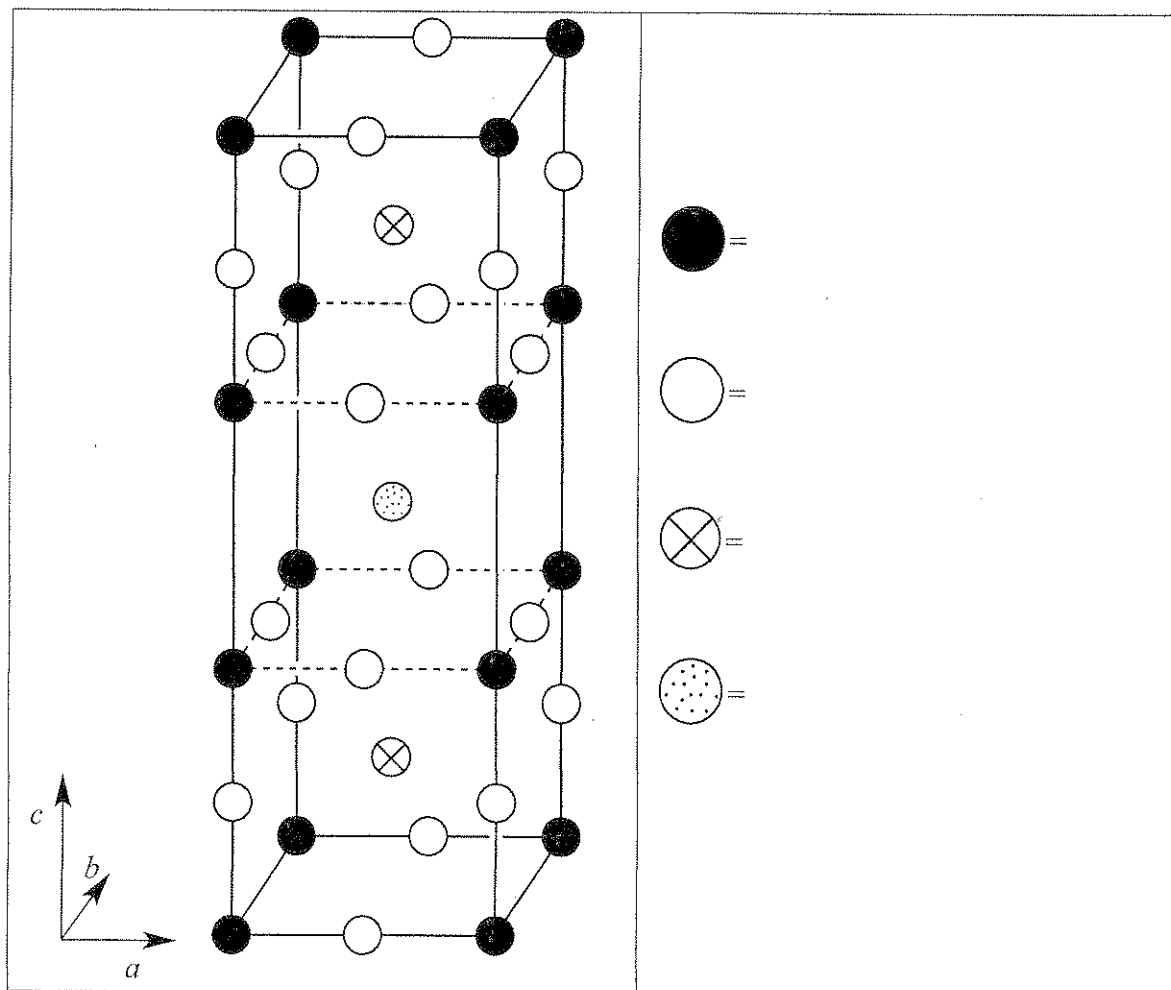
## БОДЛОГО 4

Нийт онооны 7.8%

| a  | b  | c  | d-i | d-ii | d-iii | d-iv | e-i | e-ii | Бодлого 4 | 7.8% |
|----|----|----|-----|------|-------|------|-----|------|-----------|------|
| 12 | 14 | 10 | 4   | 2    | 2     | 4    | 4   | 8    | 60        |      |

Кельвины 90 хэм орчимд хэт дамжуулах чанар үзүүлдэг нэгэн төрлийн керамик материалыг 1980-аад онд нээгжээ. Ийм нэгдлүүдийн нэг нь иттри, бари, зэс, хүчилтөрөгч агуулсан байдаг бөгөөд “YBCO” гэж нэрлэдэг. Энэ нэгдэл  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  гэсэн нэрлэсэн найрлагатай бөгөөд бодит байдалд  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  ( $0 < \delta < 0.5$ ) гэсэн томьёонд захирагдах олон янзын найрлагатай байж болно.

а. YBCO-ийн идеаль талстын бүтцийн нэгж (эгэл үүр)-ийг дараах зурагт үзүүлсэн байна. Энэхүү бүтцийн нэгж дэх аль дугуй нь аль элементэд харгалзаж байгааг тодорхойлоно уу.



Name:

Code: MNG

Бодит бүтэц нь орторомбо ( $a \neq b \neq c$ ) боловч тетрагональ гэж ойролцоолж болохоор буюу  $a \approx b \approx (c/3)$  байдаг.

**б.** YBCO-ийн  $\delta=0.25$  байх нэгэн дээжинд Cu-ийн  $K\alpha$  цацаргагч ( $\lambda=154.2\text{pm}$ ) хэрэглэн X-туяаны дифракцийн шинжилгээ хийжээ. Хамгийн бага өнцөгтэй дифракцийн пик  $2\theta=7.450^\circ$ -т ажиглагдсан.  $a=b=(c/3)$  гэж үзээд  $a$  болон  $c$ -ийн холбогдлыг тооцоолно уу.

$a =$

$c =$

**с.** Энэхүү YBCO-ийн ( $\delta=0.25$  байх) дээжийн нягтыг  $\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$ -аар тодорхойлно уу. Хэрэв таньд (б) хэсэгт тодорхойлсон  $a$  болон  $c$ -ийн холбогдол байхгүй бол  $a=500\text{pm}$   $c=1500\text{pm}$  гэсэн холбогдлыг тооцоондоо хэрэглээрэй.

Нягт =

Name:

Code: MNG

d.  $\text{YBCO}$ -ийг  $\text{HCl}$ -ийн  $1.0 \text{ M}$ -ийн уусмалд уусгахад хийн бөмбөлөг (хийн хроматографиар  $\text{O}_2$  мөн болохыг тогтоосон) үүсч байгаа нь ажиглагдана. Ууссан хийг зайлуулахын тулд  $10$  минут буцалгасны дараа уусмалыг  $\text{KI}$ -ийн илүүдэл уусмалаар үйлчлэхэд бор-шаргал өнгөтэй болсон. Үүссэн уусмалыг цардуул индикатортой тиосульфатаар титрлэж болно. Хэрэв  $\text{YBCO}$ -ийг  $\text{KI}$  болон  $\text{HCl}$ -ийн  $1.0 \text{ M}$ -ийн уусмалд  $\text{Ag}$ -ны орчинд уусгахад уусмалын өнгө бор-шаргал болох ба хий үүсч байгаа нь ажиглагдаагүй.

i. Хатуу  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.8}$ -ийг  $\text{HCl}$ -т уусгахад  $\text{O}_2$  ялгарсан урвалын ионы тэгшитгэлийг бичиж тэнцүүлнэ үү.

ii. (i)-ээс үүссэн уусмал дахь ууссан хийг зайлуулсны дараа уусмалыг хүчиллэг орчинд илүүдэл  $\text{KI}$ -оор үйлчлэхэд явагдах урвалын ионы тэгшитгэлийг бичиж тэнцүүлнэ үү.

Name:

Code: MNG

iii. (ii)-оос үүссэн уусмал тиосульфат ( $S_2O_3^{2-}$ )-аар титрлэхэд явагдах урвалын ионы тэгшитгэлийг бичиж тэнцүүлнэ үү.

iv. Ag-ны орчинд илүүдэл KI агуулсан HCl-ийн усан уусмалтай хатуу  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ -ийн харилцан үйлчлэх урвалын ионы тэгшитгэлийг бичиж тэнцүүлнэ үү.



Name:

Code: MNG

е.  $\delta$ -ийн холбогдол мэдэхгүй байгаа YBCO-ийн хоёр ижил дээжийг бэлтгэсэн байна. Эхний дээжийг HCl-ийн 1.0 M-ийн 5 мл уусмалд уусгахад  $O_2$  хий ялгарсан. Хийг зайлуулахын тулд буцалгаж хөргөсний дараа Ag-ны орчинд KI-ийн 0.7 M-ийн уусмалаас 10 мл-ийг нэмжээ. Үүссэн уусмалыг цардуул индикатортой тиосульфатаар титрлэхэд  $1.542 \times 10^{-4}$  моль тиосульфат зарцуулагдсан. Харин YBCO-ийн хоёр дахь дээжийг KI-ийн концентраци 1.0 M, HCl-ийн концентраци 0.7 M байх 7 мл уусмалд Ag-ны орчинд шууд уусгаад үүссэн уусмалыг титрлэхэд  $1.696 \times 10^{-4}$  моль тиосульфат зарцуулагдсан.

i. YBCO-ийн дээж тус бүр дэх Cu-ийн молийн тоог тооцоолно уу.

ii. YBCO-ийн эдгээр дээжийн  $\delta$ -ийн холбогдлыг тооцоолно уу.

$\delta =$

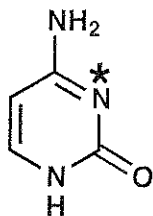
**БОДЛОГО 5****Нийт онооны 7.0%**

| a-i | a-ii | b | c | d  | e | f | Бодлого 5 |      |
|-----|------|---|---|----|---|---|-----------|------|
| 2   | 4    | 4 | 2 | 12 | 6 | 4 | 34        | 7.0% |
|     |      |   |   |    |   |   |           |      |

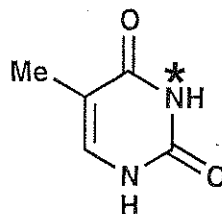
Диоксирибонуклейны хүчил (DNA) нь амьдралын үндсэн молекулуудын нэг юм. Энэ бодлогоор байгалийн болон хүн төрөлхтний бодож боловсруулсан DNA-ийн молекулын бүтцийн модификаци хийх арга замыг авч үзэх болно.

**a.** Пиридиний суурь болох цитозин (C) болон тимин (T)-ийг авч үзье. DNA-ийн молекулыг алкилжуулахад эдгээр сууриудын азотын атом N-3 (\*-оор ялгаж тэмдэглэсэн) нь нуклеофиль байрлал болох ба бусад азотын атом нь нуклеофиль төв болж чадахгүй.

**i.** C болон T суурийн алинийх нь N-3 атом илүү нуклеофиль шинжтэй байхыг заана (дүгуйлна) уу.



C



T

(i)

C

T

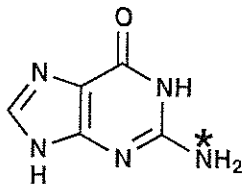
**ii.** Хариултаа батлахын тулд өөрийн сонгосон молекулын хоёр резонанс бүтцийг зурна уу. Өөрийн зурсан резонанс бүтцэд тэгээс ялгаатай формаль цэнэг бүхий атом тус бүрийн цэнэгийг харуулна уу.

(ii)

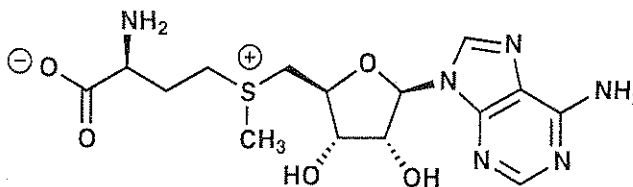
Name:

Code: MNG

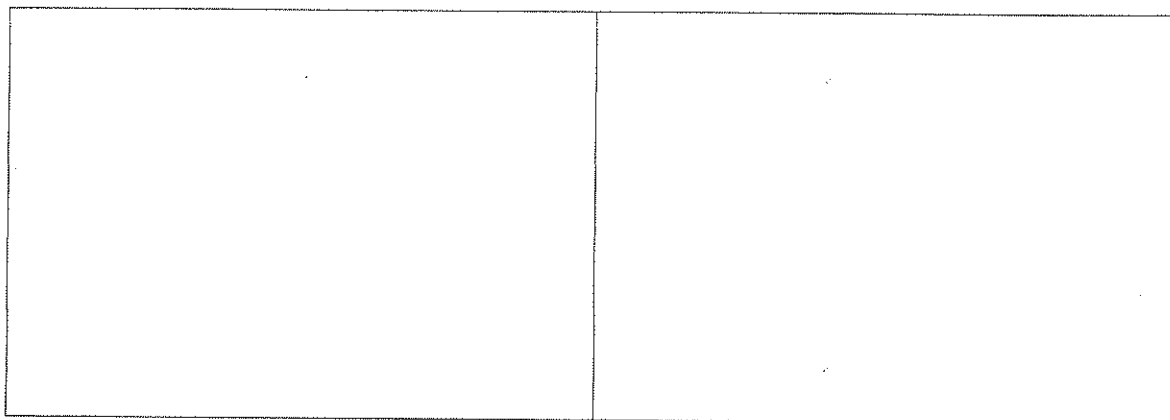
б. Байгаль дээр DNA-ийн модификацид орох үндсэн арга замын нэг нь гуанин (G)-ы (\*) байрлалд S-аденозил метионин (SAM)-аар метилжих юм. Гуанин ба SAM-ийн хооронд явагдах урвалын хоёр бүтээгдэхүүний бүтцийг зурж үзүүлнэ үү.



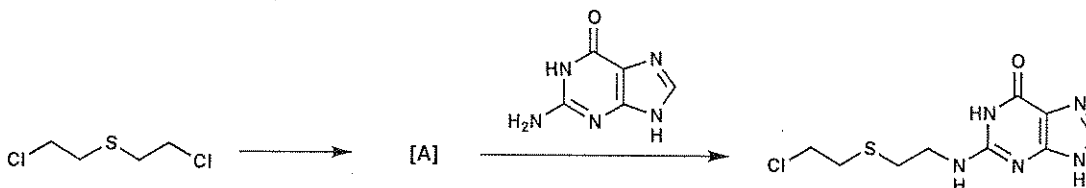
G



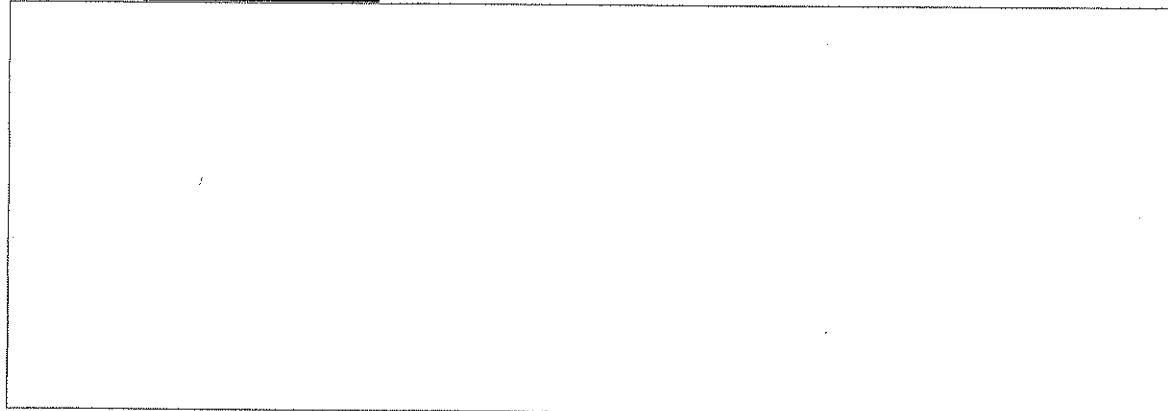
SAM



с. Хүн төрөлхтөний хамгийн анх синтезлэсэн DNA-ийг алкилжуулагч урвалжийн нэг нь иприт (mustard) юм.



Иприт нь эхлээд химийн өндөр идэвхтэй завсрын шатны А бүтээгдэхүүнийг үүсгэх ба энэ А бүтээгдэхүүн нь DNA-ийг шууд алкилжуулж зурагт үзүүлсэн бүтээгдэхүүнийг үүсгэдэг. Урвалд идэвхтэй А завсрын шатны бүтээгдэхүүний бүтцийг зурж үзүүлнэ үү.

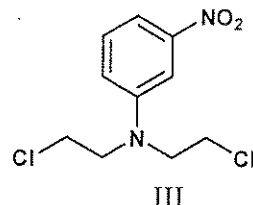
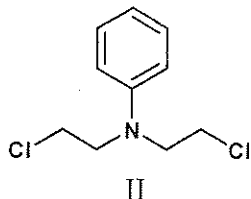
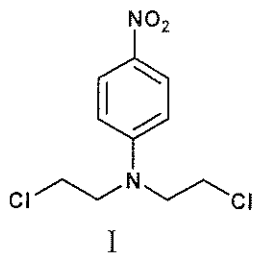


Name:

Code: MNG

d. Азотот иприт нь с хэсэгт авч үзсэн хүхэрт иприттэй төсөөтэй байдлаар урвалд ордог. Энэхүү нэгдлийн урвалд орох чадвар нь азотын атом дээрх гурав дахь халагчаас хамаарна. Төвийн азотын атомын нуклеофиль чанар нэмэгдэхэд азотот ипритийн урвалд орох чадвар нэмэгддэг. Дараах азотот ипритийн бүлэг нэгдлүүдээс хамгийн их болон хамгийн бага урвалд орох чадвартайг заана уу.

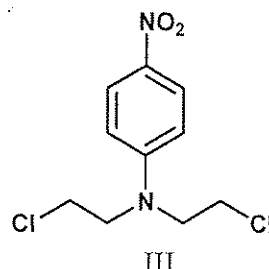
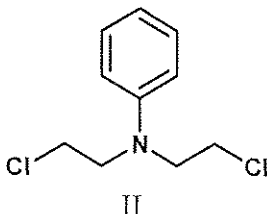
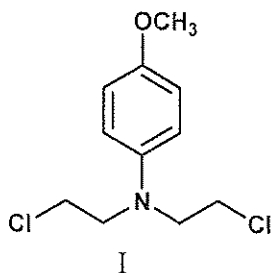
i.



ХАМГИЙН ИХ УРВАЛД ОРОХ ЧАДВАРТАЙ:

ХАМГИЙН БАГА УРВАЛД ОРОХ ЧАДВАРТАЙ:

ii.



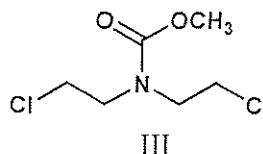
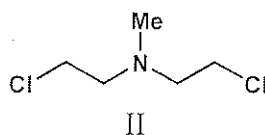
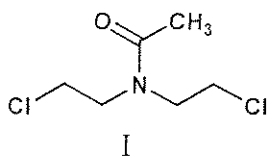
ХАМГИЙН ИХ УРВАЛД ОРОХ ЧАДВАРТАЙ:

ХАМГИЙН БАГА УРВАЛД ОРОХ ЧАДВАРТАЙ:

Name:

Code: MNG

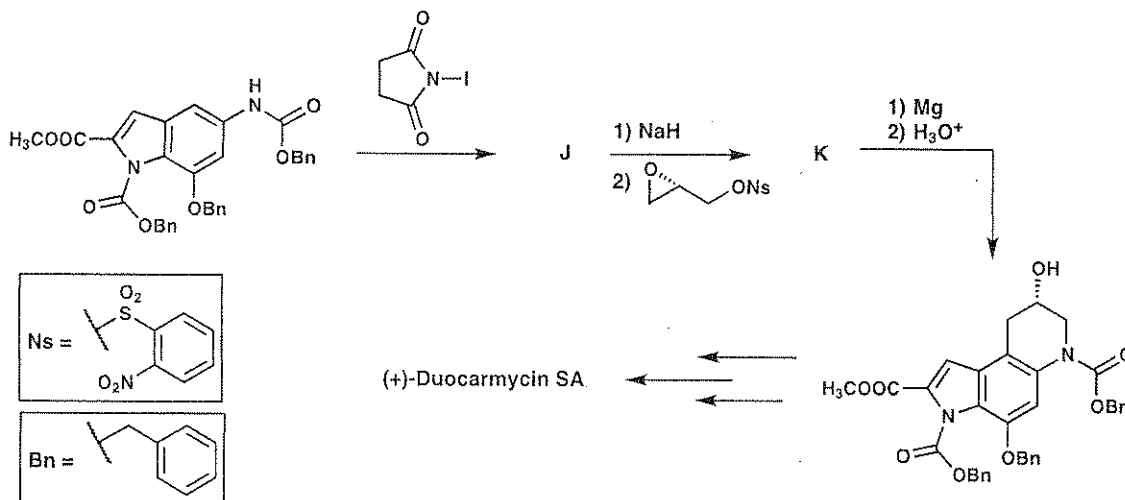
iii.



**ХАМГИЙН ИХ УРВАЛД ОРОХ ЧАДВАРТАЙ:**

**ХАМГИЙН БАГА УРВАЛД ОРОХ ЧАДВАРТАЙ:**

e. DNA-ийг алкилжуулагч байгалийн нэгдлийн зарим төрөл анги нь тэдгээрийн хавдрийн эсрэг идэвхээсээ хамааран хорт хавдрын эмчилгээнд хэрэглэх боломжтой байдаг. Ийм төрөл ангийн нэг нь дуокармицин (duocarmycins) юм. Дараах схемд байгалийн бүтээгдэхүүний асимметр синтезийн зарим шатыг харуулсан байна. Цэврээр нь ялгаж авах боломжтой **J** болон **K** нэгдлийн бүтцийг зурж үзүүлнэ үү.

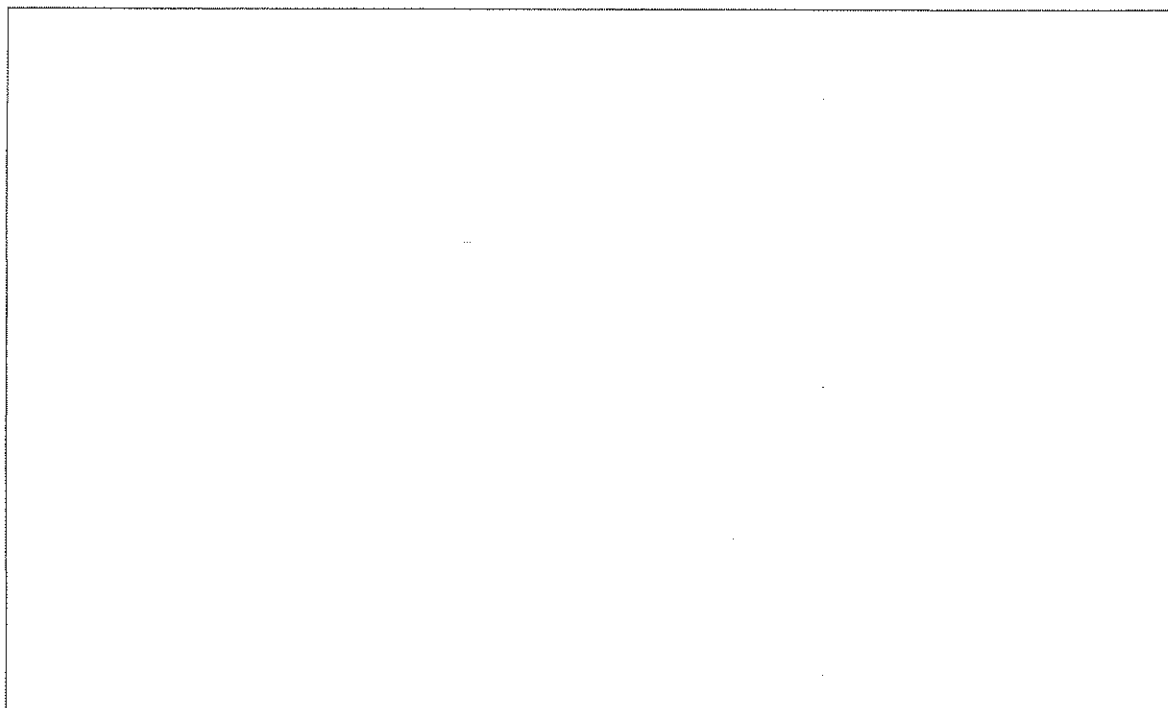
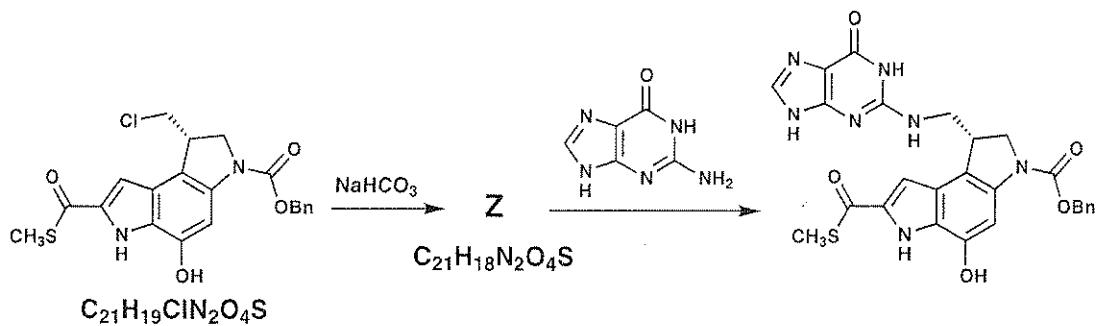


|          |          |
|----------|----------|
| <b>J</b> | <b>K</b> |
|----------|----------|

Name:

Code: MNG

f. Дуокармицин (duocartmycins)-ний үйлчлэлийг судлахын тулд нэгэн бага молекулт нэгдлийг синтезлэсэн. Үүний нэг жишээ нь дараах зурагт үзүүлсэн тиоэфир юм. Урвалд орох чадвар өндөртэй завсрын шатны бүтээгдэхүүн **Z**-ийн бүтцийг зурж үзүүлнэ үү.

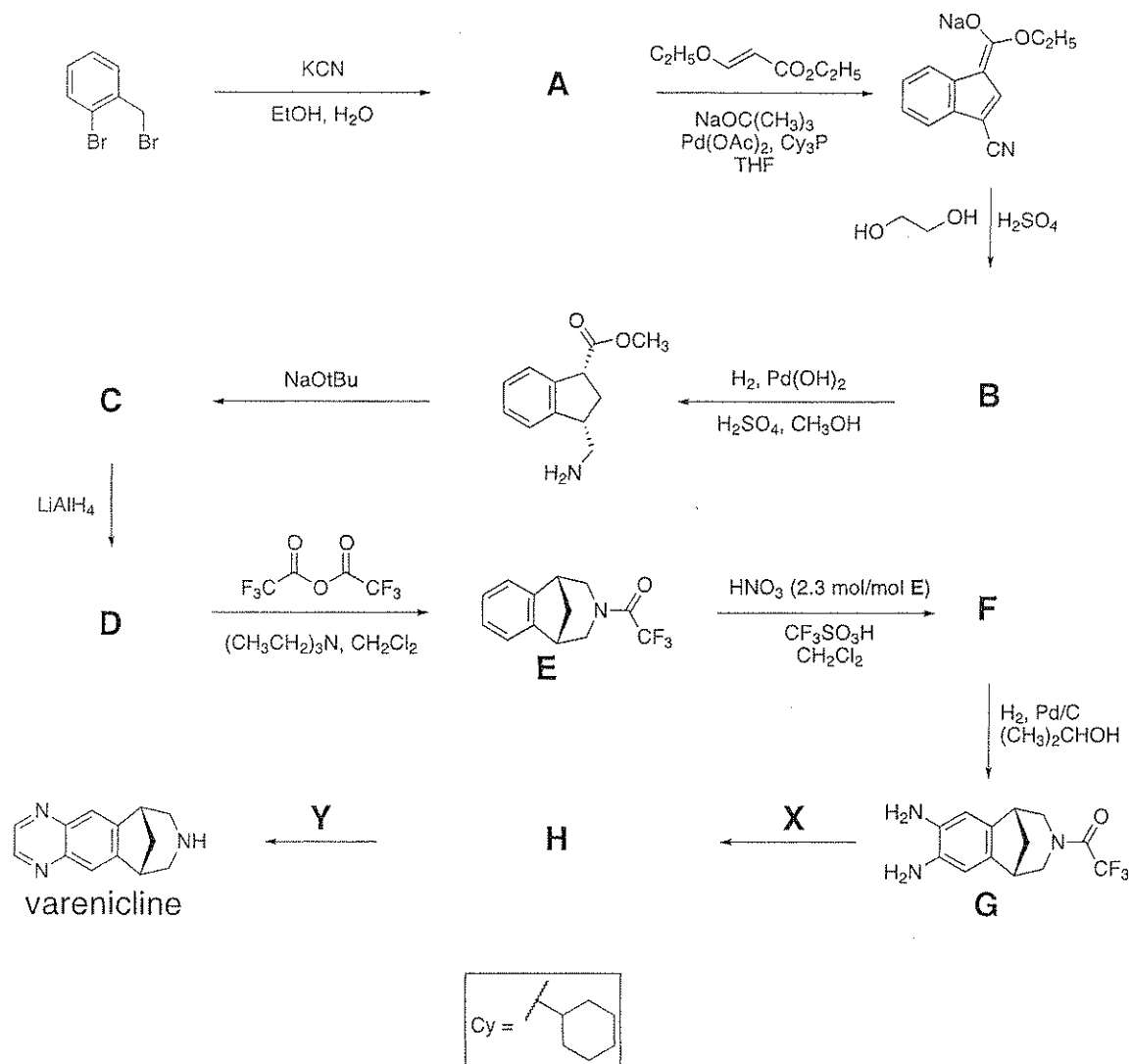


## БОДЛОГО 6

## Нийт онооны 6.6%

| a | b | c | d | Бодлого 6 | 6.6% |
|---|---|---|---|-----------|------|
| 2 | 4 | 6 | 8 | 20        |      |
|   |   |   |   |           |      |

Варениclin (varenicline)-ийг тамхилах муу зуршлийн эсрэг эмчилгээнд хэрэглэдэг бөгөөд дараах бүдүүвчийн дагуу синтезлэж болно. (A-H) үсгээр тэмдэглэсэн бүх нэгдэл нь цэнэггүй бөгөөд цэврээр нь ялгаж авах боломжтой нэгдэл юм.

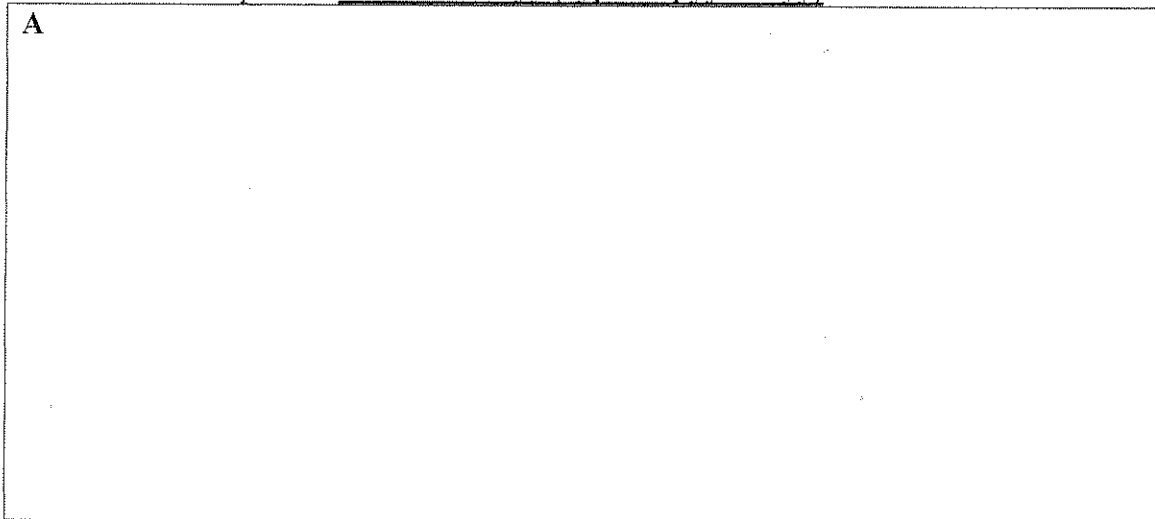


Name:

Code: MNG

а. А нэгдлийн бүтцийг таамаглана уу (зурж харуулна уу).

A



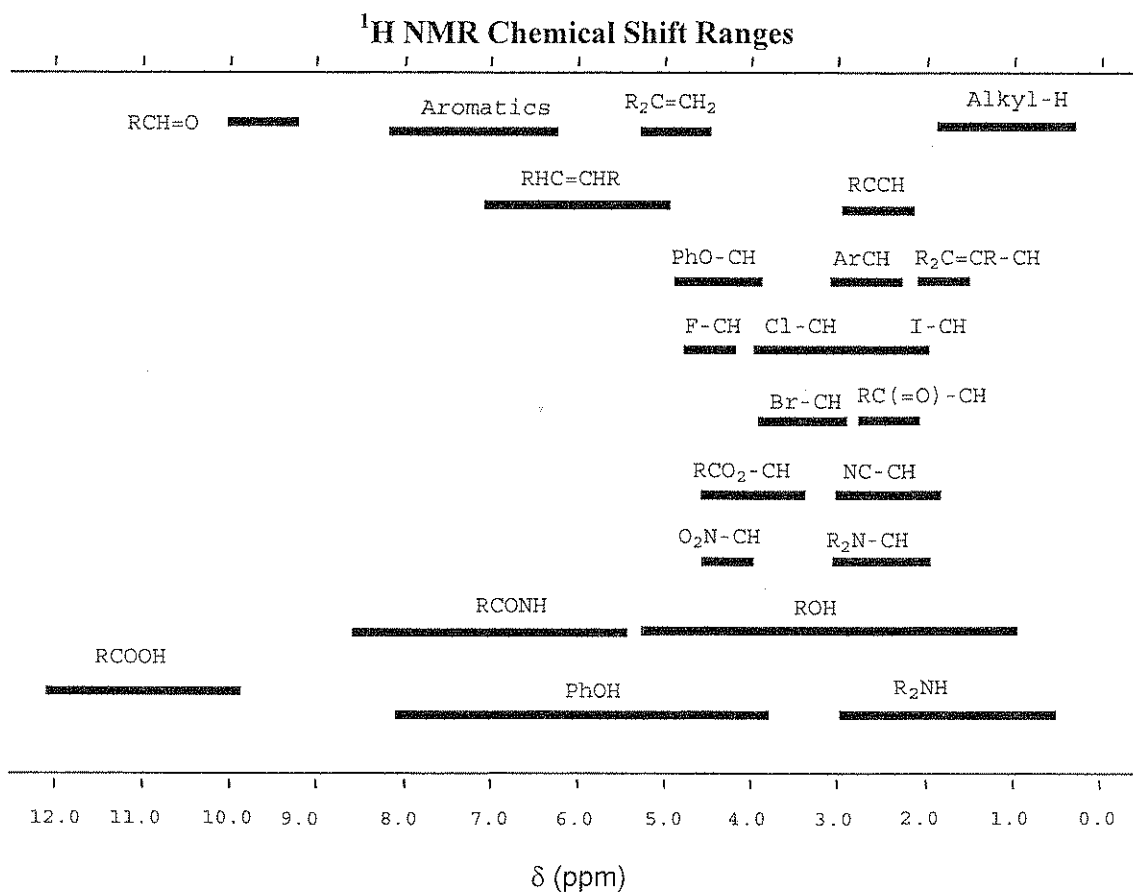
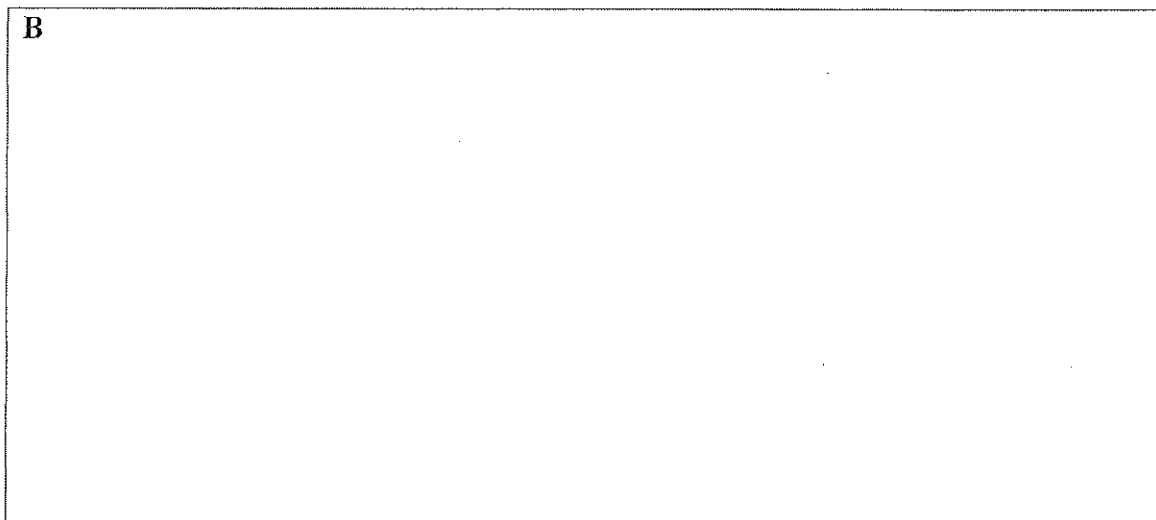


Name:

Code: MNG

b.  $^1\text{H-NMR}$ -ийн дараах өгөгдлийг үндэслэн **B** нэгдлийг бүтцийг таамаглана уу (зурж харуулна уу).

$\delta$  7.75 (синглет, 1H), 7.74 (дублет, 1H,  $J = 7.9$  Hz), 7.50 (дублет, 1H,  $J = 7.1$  Hz), 7.22 (мультиплет, 2 эквивалент биш H), 4.97 (триплет, 2H,  $J = 7.8$  Hz), 4.85 (триплет, 2H,  $J = 7.8$  Hz)



Name:

Code: MNG

c. C, D, болон E нэгдлийн бүтцийг таамаглана уу (зурж харуулна уу).

|   |   |
|---|---|
| C | D |
| F |   |

d. F нэгдлийг вареницлин (varenicline) руу хувиргах X болон Y урвалжийг таамаглаж энэ бүдүүвч дэх цэврээр нь ялгаж авах боломжтой завсрын шатны бүтээгдэхүүн G-ийн бүтцийг зурж харуулна уу.

|   |   |
|---|---|
| X | Y |
| H |   |

## БОДЛОГО 7

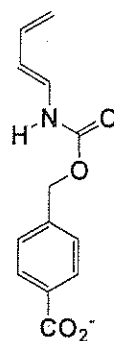
## Нийт онооны 7.5 %

| a | b  | c | d | e | f | Бодлого 7 |      |
|---|----|---|---|---|---|-----------|------|
| 9 | 15 | 8 | 6 | 8 | 6 | 52        | 7.5% |
|   |    |   |   |   |   |           |      |

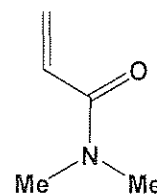
Дараах хоёр субстрат молекул (диен болон диенофил)-ыг холбох буюу тэдгээрийн хоорондын Диельс-Алдерсын урвалд катализатор болгохын тулд нийлэг энзим зохиожээ.

а. Ямар нэг энзимийн оролцоогүйгээр энэхүү хоёр нэгдлийн хооронд явагдах Диельс-Алдерын урвалаас үүсэх боломжтой найман нэгдэл байна.

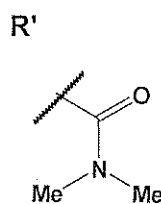
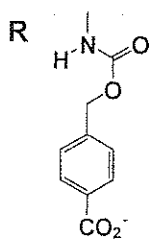
i. Дараах хоёр нүдэнд бие биедээ **байрлалын изомер** (regioisomer) байх хоёр **боломжит** нэгдлийн бүтцийг зурж үзүүлнэ үү. Зурагтаа нэгдэл тус бүрийн стереохимийг харуулахдаа шаантаг (—) болон тасархай (.....) зураасыг хэрэглээрэй. Дараах зурагт үзүүлсэн, урвалд шууд оролцохгүй халагч бүлгүүдийг илэрхийлсэн R болон R'-ийг хэрэглээрэй.



diene  
диен



dienophile  
диенофил



|  |  |
|--|--|
|  |  |
|--|--|

Name:

Code: MNG

ii. Дараах хоёр нүдэнд бие биедээ энантиомер болдог **боломжит** хоёр нэгдлийн бүтцийг зурж үзүүлнэ үү. Зурагтаа нэгдэл тус бүрийн стереохимийг харуулахдаа шаантаг ( — ) болон тасархай ( ..... ) зураасыг хэрэглээрэй. Хэсэг (i)-ийн адил **R** болон **R'**-ийг хэрэглээрэй.

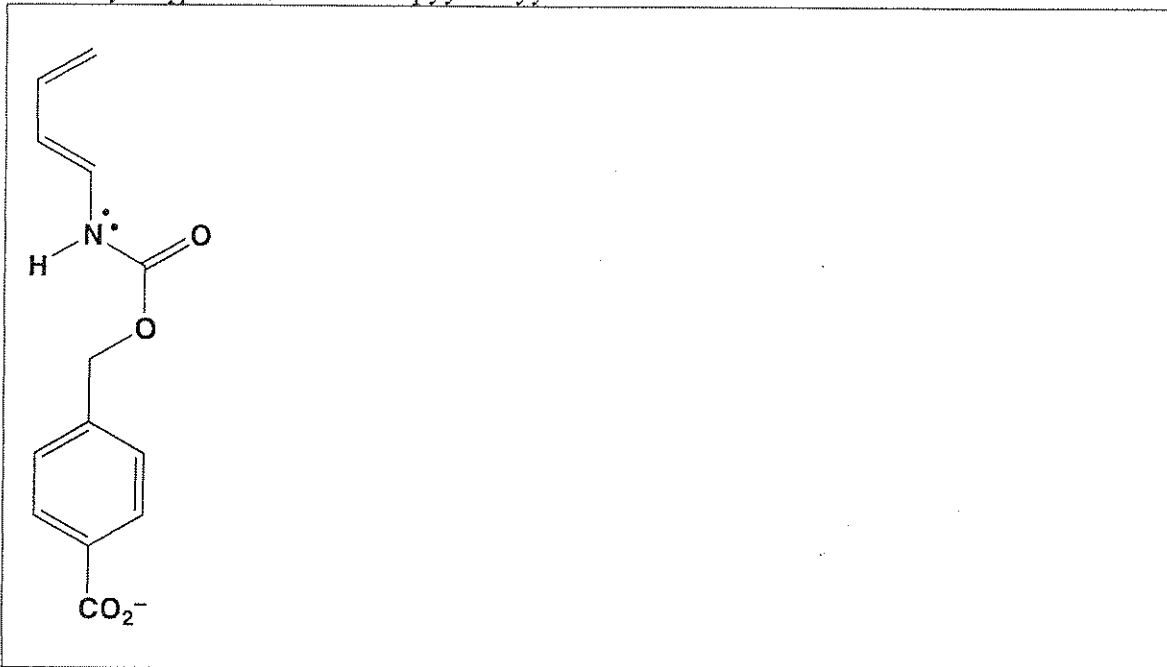
|  |  |
|--|--|
|  |  |
|--|--|

iii. Дараах хоёр нүдэнд бие биедээ диастереоизомер болдог **боломжит** хоёр нэгдлийн бүтцийг зурж үзүүлнэ үү. Зурагтаа нэгдэл тус бүрийн стереохимийг харуулахдаа шаантаг ( — ) болон тасархай ( ..... ) зураасыг хэрэглээрэй. Хэсэг (i)-ийн адил **R** болон **R'**-ийг хэрэглээрэй.

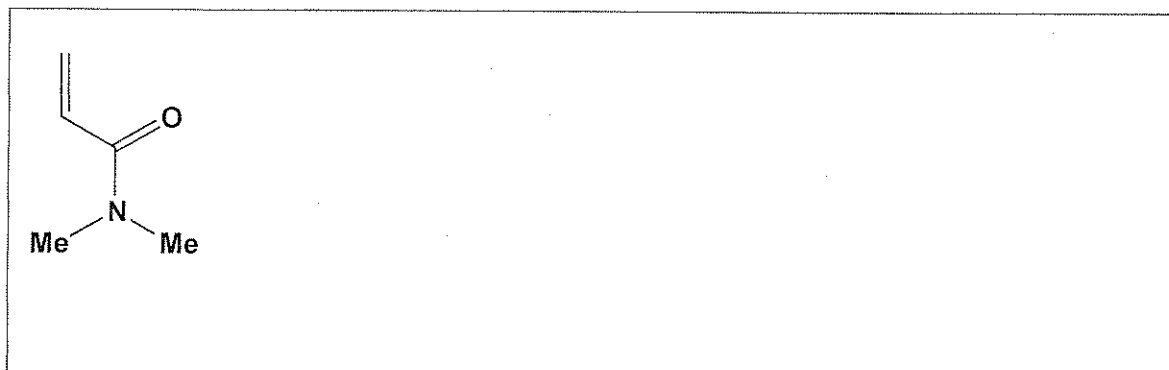
|  |  |
|--|--|
|  |  |
|--|--|

б. Диельс-Алдерын урвалын хурд болон байрлалын сонгомол чанар нь хоёр урвалдагч бодисын электроны нэмэгдэх чанарын (electronic complementarity) зэргээс хамаардаг. Хэсэг а дахь диен болон диенофил нэгдлийн бүтцийг дараах зурагт харуулсан байна.

и. Диены молекул дахь, электроны нягт нь ихэссэнээс урвалын үед электрон донорын үүрэг гүйцэтгэдэг нүүрстөрөгчийн атомыг дүгуйлна уу. Өөрийн хариултаа нотлохын тулд диены бүтцийн тохирох нэг резонанс бүтцийг зурж үзүүлнэ үү. Өөрийн зурсан резонанс бүтцэд тэгээс ялгаатай формаль цэнэг бүхий атом тус бүрийн цэнэгийг харуулна уу.



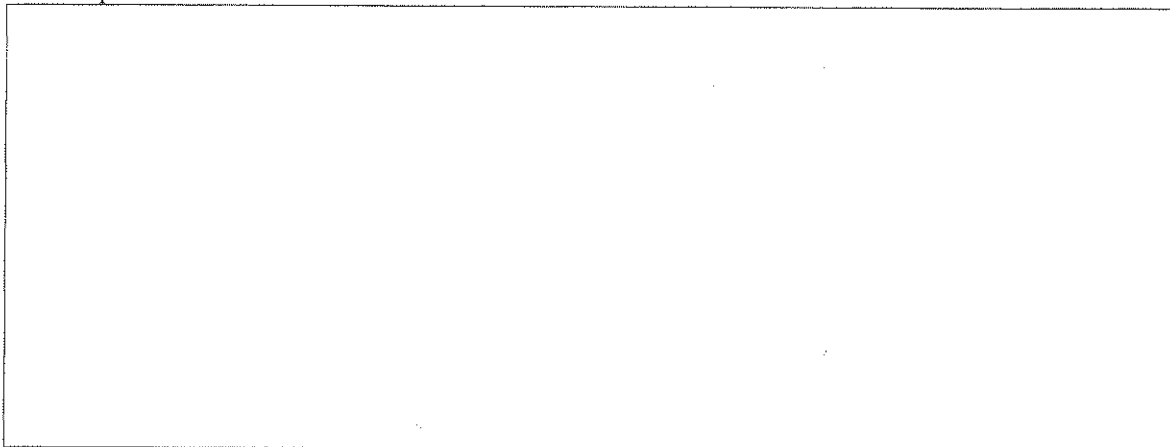
ii. Диенофил молекул дахь, электроны нягт буурсанаас урвалын үед электрон акцепторын үүрэг гүйцэтгэдэг нүүрстөрөгчийн атомыг дүгуйлна уу. Өөрийн хариултаа нотлохын тулд диенофилийн бүтцийн тохирох нэг резонанс бүтцийг зурж үзүүлнэ үү. Өөрийн зурсан резонанс бүтцэд тэгээс ялгаатай формаль цэнэг бүхий атом тус бүрийн цэнэгийг харуулна уу.



Name:

Code: MNG

iii. Хэсэг (i), (ii)-т хийсэн өөрийн гүйцэтгэлдээ үндэслэн диен болон диенофилийн хооронд явагдах катализаторгүй Диельс-Алдерын урвалын үндсэн бүтээгдэхүүний бүтцийг зурж харуулна уу. Бүтээгдэхүүний стереохимийг заавал зурж үзүүлэх албагүй.

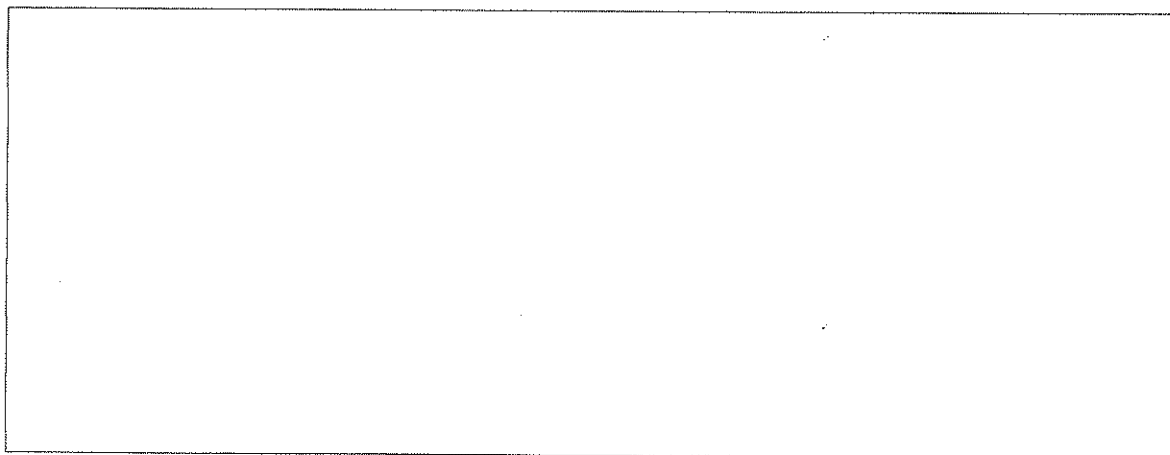
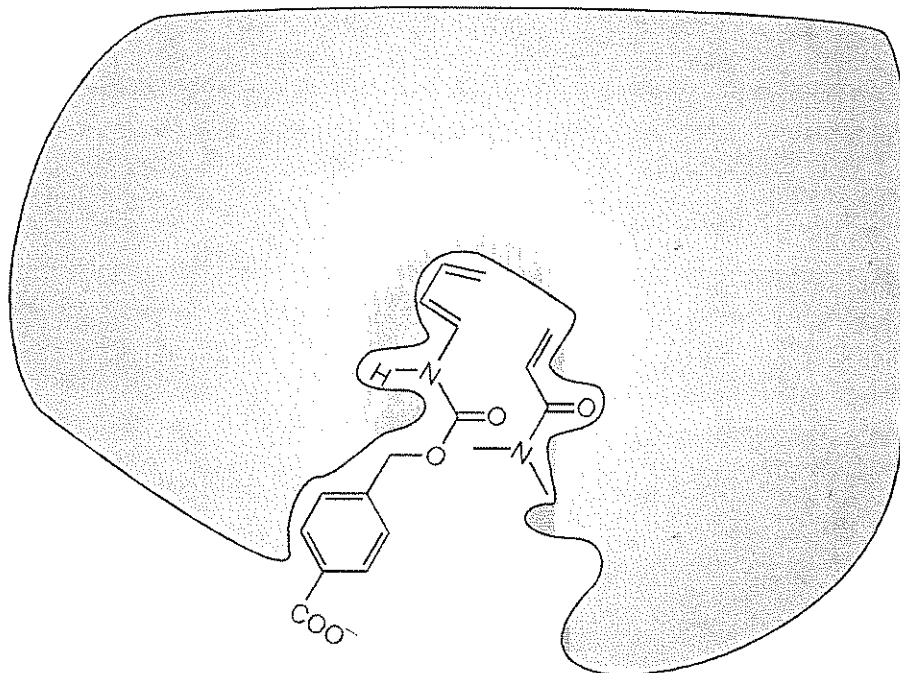


Name:

Code: MNG

с. Дараах зурагт Диельс-Алдерын урвалын урвалжууд бүтээгдэхүүн үүсгэх завсрын шатанд орохын өмнө нийлэг энзимийн идэвхтэй хөндийд холбогдох (уягдах) байдлыг харуулсан байна. Саарал хэсэгт энзимийн хөндлөн огтлол (cross-section)-ыг үзүүлсэн байна. Зурагт үзүүлснээр идэвхтэй хөндийд хоёр молекул холбогдох үед диенофил нь хөндлөн огтлол (cross-section)-ы хавтгайн **доор** байхад диен нь хөндлөн огтлол (cross-section)-ы хавтгайн **дээр** байна.

Өгөгдсөн нүдэнд энзим-катализатортой урвалын бүтээгдэхүүний бүтцийг зурж үзүүлнэ үү. Асуулт **а**-д хийсний нэгэн адилаар зурагтаа бүтээгдэхүүний стереохимийг харуулж, **R** болон **R'**-ийг хэрэглээрэй.



Name:

Code: **MNG**

**d.** Энзим (нийлэг болон байгалийн)-ийн тухай дараах тодорхойлолтуудыг анхаарч үзнэ үү. Тодорхойлолт тус бүрийн хувьд үнэн “True”, эсвэл худал “False” болохыг заана уу. (Үнэн бол “True”, худал бол “False”-ийг дугуйлна.)

**i.** Энзим нь урвалын эх болон бүтээгдэхүүн бодисоос завсрын шатны бодистой илүү нягт холбогддог.

**True**

**False**

**ii.** Энзим нь урвалын тэнцвэрийн тогтмолыг бүтээгдэхүүн үүсэх тийш өөрчилдөг.

**True**

**False**

**iii.** Катализаторгүй урвалтай харьцуулахад энзимт катализатор нь урвалын идэвхжилийн энтропийг ямагт ихэсгэдэг.

**True**

**False**



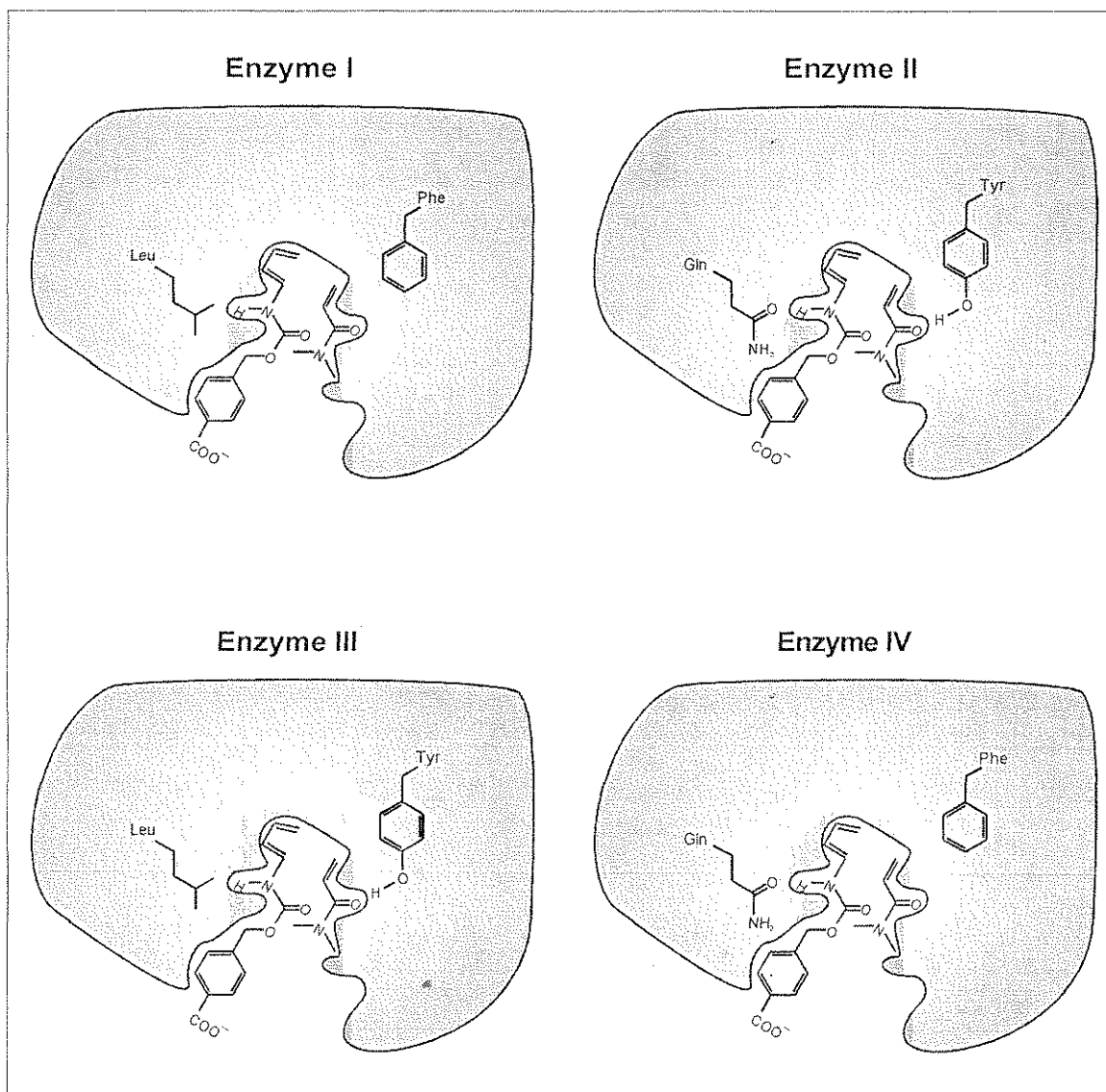
Name:

Code: MNG

е. Янз бүрийн каталитик идэвхтэй нийлэг энзимийн сайжруулсан хувилбар (дараах зурагт үзүүлсэн I, II, III болон IV гэсэн энзимүүд)-ыг бэлтгэсэн байна. Зурагт үзүүлсэн хоёр амин хүчлийн үлдэгдэл нь энзимүүдийг хооронд нь ялгаатай болгож байна. Энзимийн идэвхтэй хөндийд урвалжууд завсрын шат үүсгэх үед энзимийн функциональ бүлэг нь урвалжийн зохих хэсэгт ойрхон байрлаж байхаар зурагт үзүүлсэн гэж үзнэ.

Энэ дөрвөн энзимийн аль нь катализаторгүй урвалтай харьцуулахад Диельс-Алдерын урвалын хурдыг хамгийн ихээр нэмэгдүүлж чадах вэ?

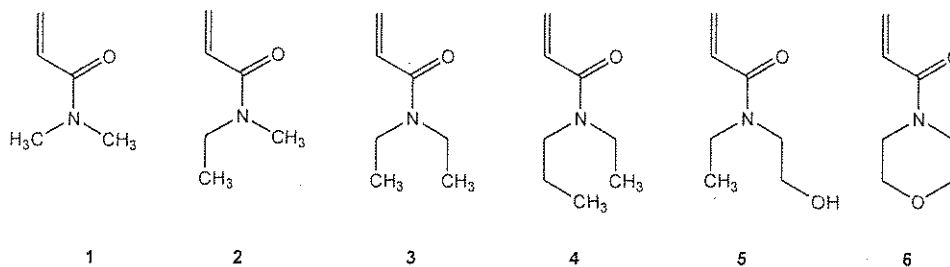
Энзим #



Name:

Code: MNG

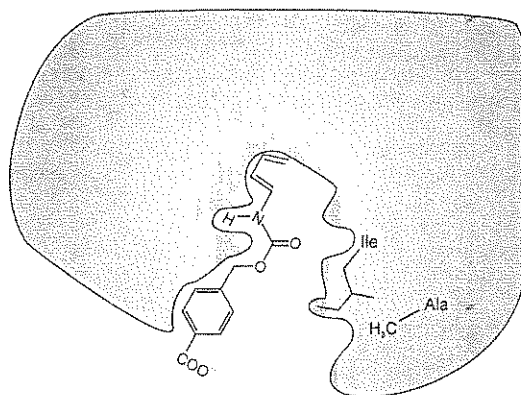
f. Дараах 1-6 диенофил урвалжийг хэрэглэн нийлэг энзим V, VI-ийн субстратийн онцлогийг шинжиж судалсан байна.



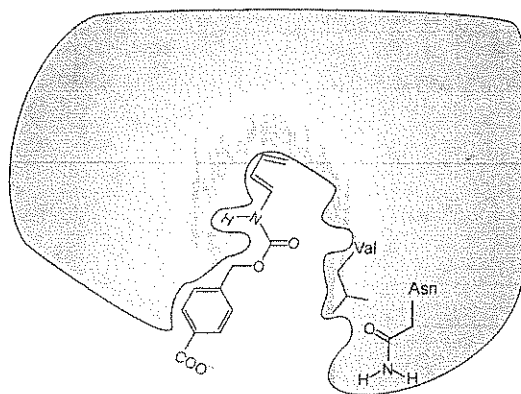
Энзим V-ийг (дараах зургийг харна уу) катализатор болгон авсан урвалд диенофил #1 хамгийн хурдан урвалд орсон. Гэхдээ нийлэг энзим VI нь бусад диенофил урвалжтай урвалыг хамгийн ихээр хурдасгасан. Энзим VI-аар хурдасгасан Диельс-Алдерын урвалд дээрх зургаан диенофил урвалжийн аль нь хамгийн хурдан орох вэ?

Диенофил #

Enzyme V



Enzyme VI

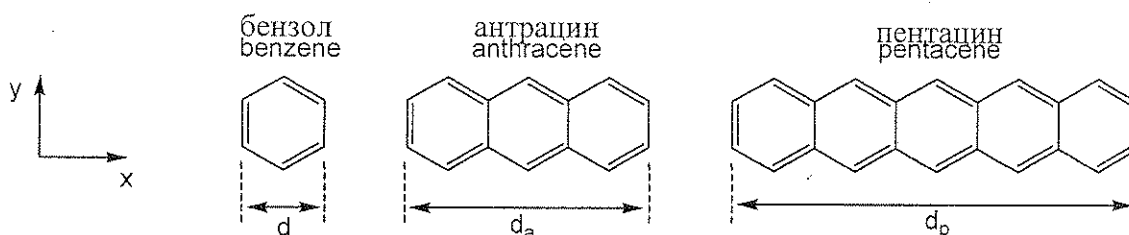


## БОДЛОГО 8

## Нийт онооны 8.3%

| a | b-i | b-ii | b-iii | b-iv | b-v | c-i | c-ii | c-iii | Бодлого 8 |      |
|---|-----|------|-------|------|-----|-----|------|-------|-----------|------|
| 2 | 3   | 4    | 6     | 4    | 2   | 5   | 8    | 2     | 36        | 8.3% |
|   |     |      |       |      |     |     |      |       |           |      |

Полицигаираг ароматик нүүрсустөрөгчид (polycyclic aromatic hydrocarbons - PAHs) нь агаарыг бохирдуулагч, гэрэл ялгаруулагч органик диодын бүрэлдэхүүн, мөн одод хоорондын орон зайн бүрэлдэхүүн тус тус болдог. Энэ даалгавраар зөвхөн бензолын цагираг янз бүрийн урттай холбогдсон байдаг, шугаман PAHs гэж нэрлэгддэг нэгдлүүдийг авч үзэх болно. Тусгайлсан жишээ болох бензол, антрацин, пентациний бүтцийг дараах зурагт үзүүлсэн байна. Эдгээрийн физикийн болоод химийн шинж чанар нь хэлхээний уртаас, мөн  $\pi$  электрон үүл хэлхээний дагууд хэрхэн үл байршсанаас хамаардаг.



а. Бензолын цагирагийн эсрэг талын хоорондын зай  $d=240$  pm байдаг. Энэ мэдээллийг ашиглан антрацин болон пентациний хэвтээ ( $x$ )-тэнхлэгийн дагуух төгсгөл хоорондын зай,  $d_a$ ,  $d_p$ -г тооцоолно уу.

Антрациний хувьд,  $d_a =$

Пентациний хувьд,  $d_p =$

б. Хэрэв ароматик цагираг тус бүрийг квадрат хэлбэртэй гэж хялбарчилвал PAHs дахь холбогдсон  $\pi$  электронуудыг  $x$ - $y$  хавтгай дахь тэгш өнцөгт хоёр хэмжээт хайрцаг дахь чөлөөт жижиг хэсэг гэж загварчилж болно.

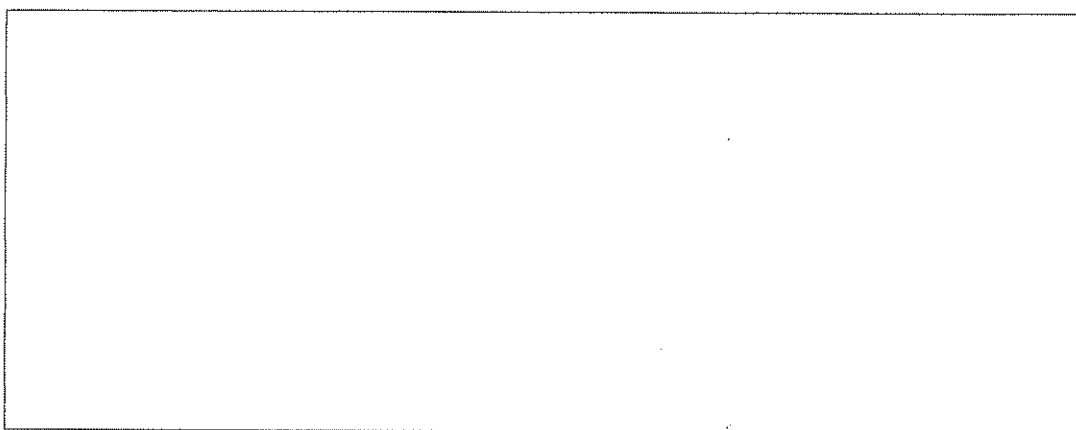
$x$ - болон  $y$ - тэнхлэгийн дагуух хоёр хэмжээт хайрцаг дахь электронуудын хувьд электроны квантчилагдсан энергийн төлөв байдал нь дараах тэгшитгэлээр илэрхийлэгдэнэ.

$$E = \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right) \frac{h^2}{8m_e}$$

Энэ тэгшитгэлд,  $n_x$  ба  $n_y$  - энергит төлвийн квантын тоо бөгөөд  $l$ -ээс  $\infty$  хүртэлх бүхэл тоо,  $h$  - Планкийн тогтмол,  $m_e$  - электроны масс,  $L_x$  ба  $L_y$  - хайрцагны чиглэл болно.

Энэ даалгаврын хувьд РАНs-ийн  $\pi$  электронуудыг хоёр хэмжээст хайрцагт байгаа жижиг хэсэг гэж үзнэ. Энэ тохиолдолд,  $n_x$  ба  $n_y$  квантын тоо нь **хоорондоо хамааралгүй**.

i. Энэ даалгаварт бензолыг  $x$  болон  $y$  чиглэл нь тус бүр  $d$  урттай гэж үзнэ. Шугаман РАНs дахь квантчилагдсан энергийн ерөнхий тэгшитгэлийг квантын тоо  $n_x$  ба  $n_y$ , урт  $d$ , холбогдсон цагирагийн тоо  $z$  болон үндсэн тогтмолуудаас хамаарсан функц хэлбэрээр бичнэ үү.



ii. Пентациний энергийн түвшний дараах диаграмд эсрэг спинтэй электроныг дээш, доош заасан сумаар илэрхийлж,  $\pi$  электроноор дүүргэгдсэн болон электроноор дүүргэгдээгүй бүх түвшний энерги болон  $n_x$ ,  $n_y$  квантын тоог чанарын хувьд үзүүлсэн байна. Түвшин тус бүрийн квантын тоо ( $n_x$  ба  $n_y$ )-г харуулжээ.

Пентацин:

\_\_\_\_\_ (3; 2)  
 $\uparrow\downarrow$  (9; 1)  
 $\uparrow\downarrow$  (2; 2)  
 $\uparrow\downarrow$  (1; 2)  
 $\uparrow\downarrow$  (8; 1)  
 $\uparrow\downarrow$  (7; 1)  
 $\uparrow\downarrow$  (6; 1)  
 $\uparrow\downarrow$  (5; 1)  
 $\uparrow\downarrow$  (4; 1)  
 $\uparrow\downarrow$  (3; 1)  
 $\uparrow\downarrow$  (2; 1)  
 $\uparrow\downarrow$  (1; 1)

Антрацины энергийн түвшний диаграммыг дараах зурагт үзүүлсэн байна. Зарим энергийн түвшин ижил энергитэй байна. Антрацин дахь  $\pi$  электроныг харуулахын тулд энэ энергийн диаграмд дээш болон доош заасан зохих тооны сумыг байрлуулна уу. Мөн диаграммын хаалт дахь хоосон зайд харгалзах квант тоо  $n_x$ ,  $n_y$ -ийг Та тодорхойлох ёстой. Дүүргэгдсэн болон дүүргэгдээгүй энергийн түвшин тус бүрийн хувьд тохирох квант тоо  $n_x$ ,  $n_y$ -ийг хоосон зайд бичнэ үү.

Антрацин:

\_\_ ( ; )

\_\_ ( ; )    \_\_ ( ; )

\_\_ ( ; )

\_\_ ( ; )

\_\_ ( ; )

\_\_ ( ; )

\_\_ ( ; )

\_\_ ( ; )

\_\_ ( ; )

iii. Энэ загварыг хэрэглэн бензолын энергийн түвшний диаграммыг байгуулж, энергийн түвшингүүдийг электроноор дүүргэнэ үү. Дүүргэгдсэн болон дүүргэгдээгүй бүх энергийн түвшинг багтаасан байна. Өөрийн байгуулсан диаграм дахь энергийн түвшин тус бүрт харгалзах квантын тоо  $n_x$ ,  $n_y$ -ийг бичнэ үү. Энд хэрэглэсэн тэгш өнцөгт хайрцаг дахь жижиг хэсгийн загварт энергийн түвшингүүд нь бусад загвартай адил байна гэж үзэхгүй.

Name:

Code: MNG

iv. PAHs-ийн урвалд орох чадвар нь электроноор дүүргэгдсэн өндөр энергийн түвшин, дүүргэгдээгүй нам энергийн түвшиний хоорондох энергийн зөрөө  $\Delta E$ -ээс урвуу хамааралтай байдаг. Бензол, антрацин, пентацины электроноор дүүргэгдсэн өндөр энергийн түвшин, дүүргэгдээгүй нам энергийн түвшиний хоорондох энергийн зөрөө,  $\Delta E$ -г (Жоулиар) тооцоолно уу. Антрацин болон бензолын хувьд харгалзан ii) болон iii) хэсэгт гүйцэтгэсэн үр дүнгээ хэрэглэнэ. Хэрэв таньд хэрэглэх үр дүн байхгүй бол энэ хоёр молекулын хувьд дүүргэгдсэн өндөр энергийн түвшинд (2, 2), дүүргэгдээгүй нам энергийн түвшинд (3, 2) гэсэн холбогдол (эдгээр холбогдол нь үнэн биш байж болно)-ыг хэрэглээрэй.

Бензолын хувьд  $\Delta E$ :

Антрациний хувьд  $\Delta E$ :

$\Delta E$  for pentacene:

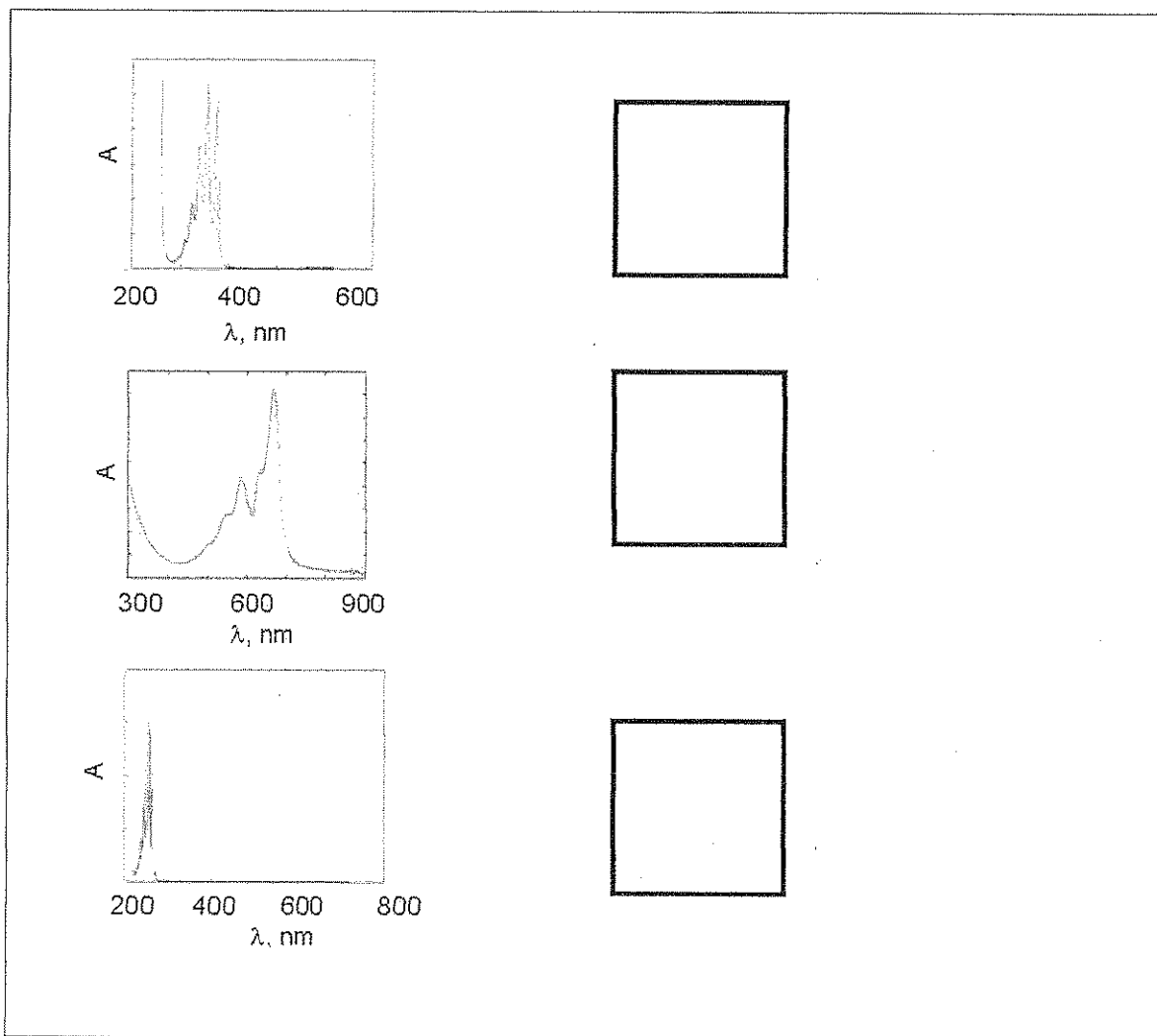
Name:

Code: MNG

Бензол (B), антрацин (A), пентацин (P)-ийг урвалд орох чадварын өсөх дарааллаар зэрэглэж дараах хайрцагт харгалзах үсгийг зүүн гар талаас баруун гар тийш эгнүүлэн байрлуулна уу.

Хамгийн бага урвалд орох чадвартай -----> Хамгийн их урвалд орох чадвартай

v. Бензол (B), антрацин (A), пентацин (P)-ий электроны шингээлтийн спектр (молийн шингээлт ба долгионы урт)-ийг дараах зурагт үзүүлсэн байна. Хайрцагдах жижиг хэсгийн загварчлалын талаарх ойлголт (чанарын)-доо үндэслэн аль спектр нь аль молекулынх болохыг зааж баруун гар талын нүдэнд харгалзах үсгийг бичнэ үү.

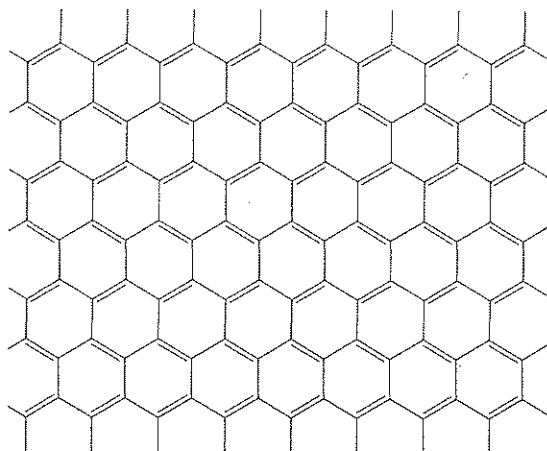


Name:

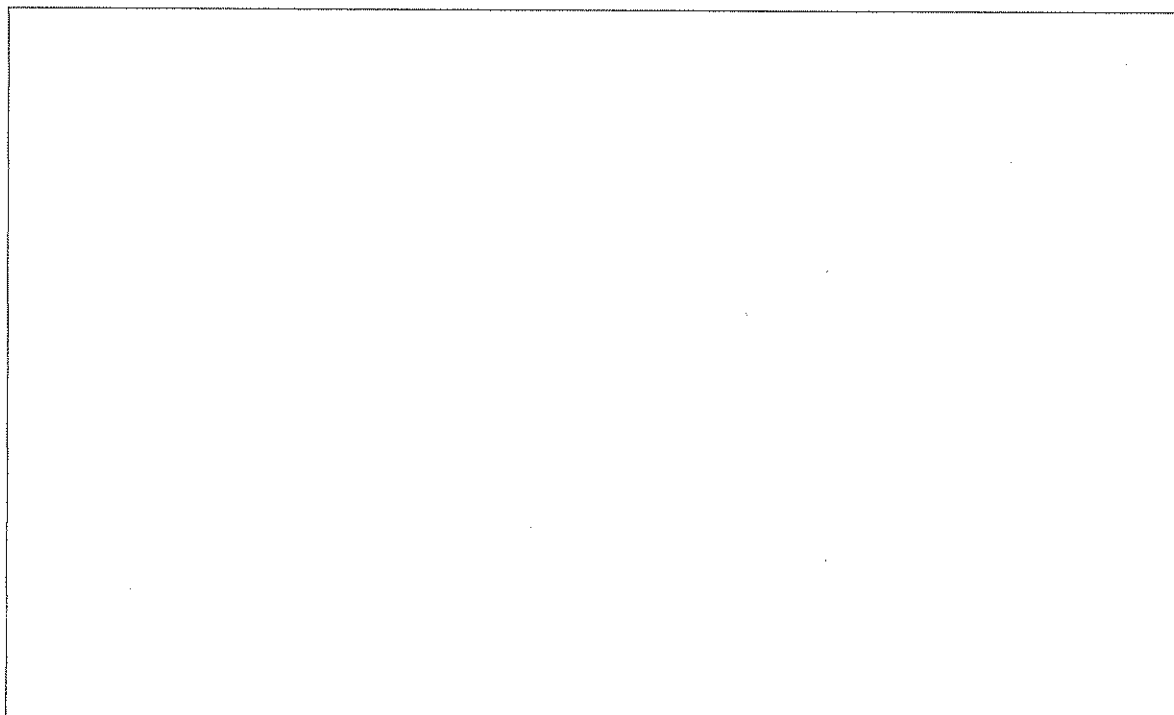
Code: **MNG**

с. Графен нь нүүрстөрөгчийн атомууд зөгийн сархинаг хэлбэрээр холбогдсон хоёр хэмжээст хуудас юм. Үүнийг тодорхой бус урттай, хоёр хэмжээст, полиароматик нүүрсүстөрөгчийн онцгой тохиолдол гэж үзэж болно. Эрдэмтэн Андрей Гейм болон Константин Новоселов нар 2010 онд Графен хуудас гарган авах туршилтаараа Физикийн салбарт Нобелийн шагналыг авчээ.

$L_x=25$  нм,  $L_y=25$ нм хэмжээтэй Графены хавтгай хуудас өгөгдсөн гэж үзье. Энэ хуудасны зарим хэсгийг дараах зурагт үзүүлэв.



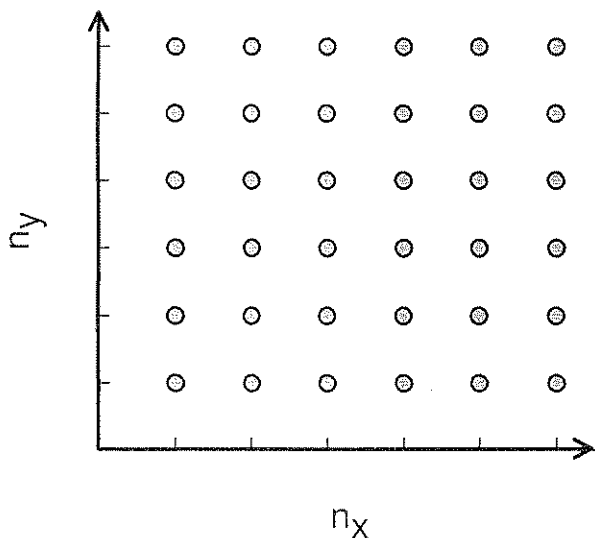
i. 6 нүүрстөрөгчийн атомт нэгж гексагоналийн талбай нь  $\sim 52400\text{pm}^2$  байдаг. Графены хуудас (25нм х 25нм) дахь  $\pi$  электроны тоог тооцоолно уу. Энэ даалгаврыг гүйцэтгэхдээ захын электроныг тооцохгүй байж болно (өөрөөр хэлбэл, зураг дахь захыг бүрэн гексагональ гэж үзнэ).





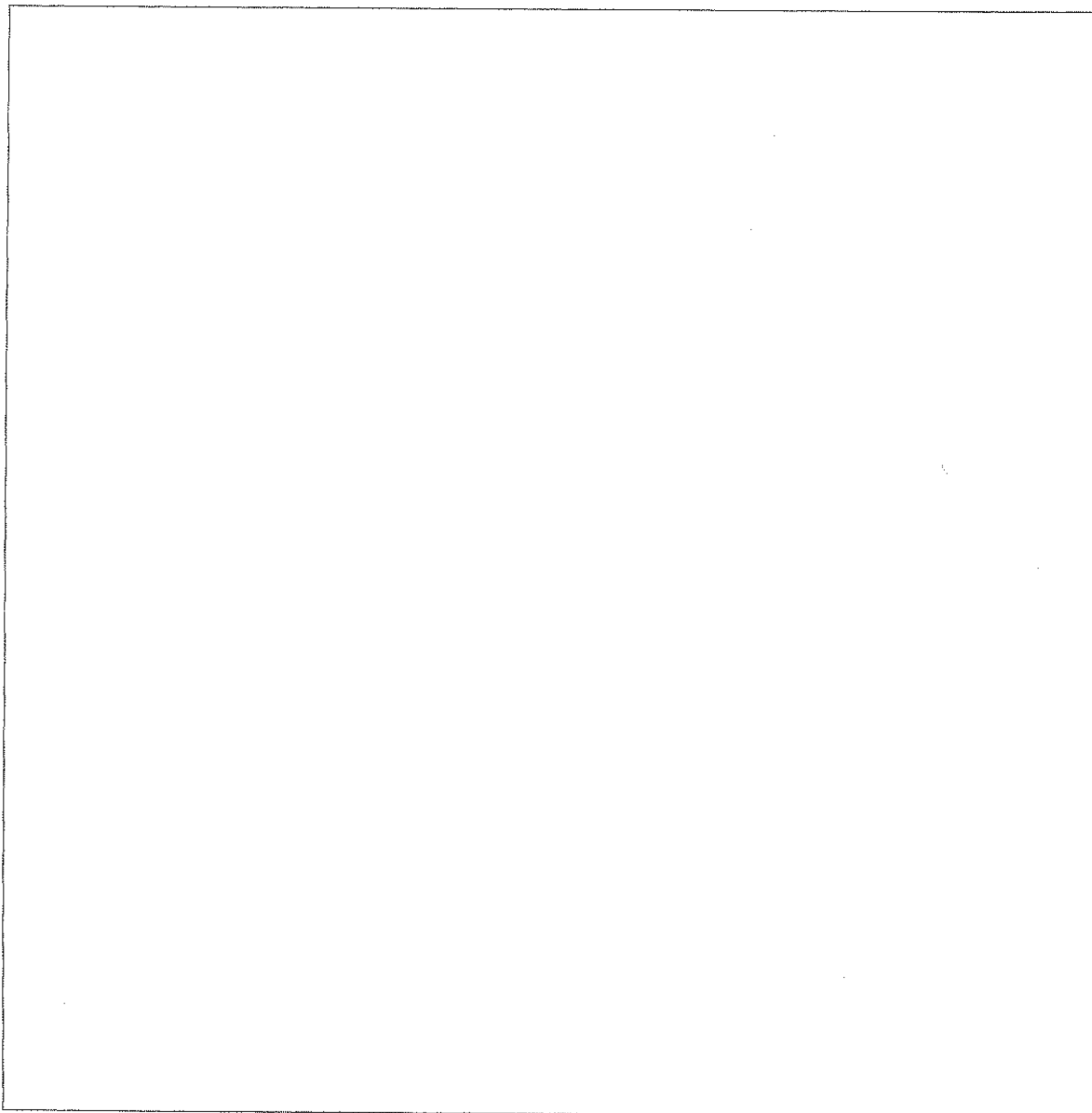
ii. Графен дахь  $\pi$  электроныг хоёр хэмжээст чөлөөт электронууд гэж үзэж болно.

Маш олон тооны электрон агуулсан системд өндөр энергитэй дүүргэгдсэн түвшин дангаараа байдаггүй. Харин ойролцоо энергитэй эдгээр энергийн түвшингүүд нь хоосон байдаг. Эдгээр өндөр дүүргэгдсэн төлвийг Фермийн түвшин гэж нэрлэдэг. Графен дахь Фермийн түвшинд квантын тоо  $n_x, n_y$  нь олон дахин хослосон байдаг. Графены  $25\text{нм} \times 25\text{нм}$  квадратын хувьд хамгийн доод дүүргэгдсэн түвшинд харгалзах Фермийн түвшний энергийг тодорхойл. Хамгийн доод дүүргэгдсэн түвшний энерги тэгээс ялгаатай, гэхдээ үүнийг үл тооцоод тэгтэй тэнцүү гэж үзэж болно. Энэ даалгаврыг гүйцэтгэхийн тулд квант төлөв  $(n_x, n_y)$ -ийг 2-D тор дээрх цэг бөгөөд хос электроноор дүүргэгдэх энергийн түвшин гэж үзэх нь зүйтэй болно. Электроны тоогоор хэсэг (i)-д гаргасан үр дүнгээ хэрэглэх ба ийм үр дүн байхгүй бол 1000 гэсэн холбогдол (энэ нь зөв биш холбогдол байж болно)-ыг хэрэглээрэй.



Name:

Code: MNG



iii. Графен төст материалын цахилгаан дамжуулах чанар нь хамгийн бага дүүргэгдээгүй болон хамгийн өндөр дүүргэгдсэн түвшиний хоорондох энергийн зөрөөнөөс урвуу хамааралтай. Өөрийн хийсэн шинжилгээний дүн, РАНs болон графен дахь  $\pi$  электроны талаарх ойлголтоо хэрэглэж өгөгдсөн температурт 25нм x 25нм Графены квадратын цахилгаан дамжуулах чанар нь 1м x 1м Графены квадрат (Гейм, Новоселов нарын гаргаж авсан дээд хэмжээтэй ойролцоо)-ын цахилгаан дамжуулах чанараас бага, тэнцүү, эсвэл их байхын аль нь болохыг таамаглана уу. Зөв хариултыг дугуйлна уу.

бага

тэнцүү

их