Вопросы для подготовки к экзамену по дисциплине «Спектральные методы в химии» для студентов 2-го курса института химии

Раздел «***Введение***»

1. Понятие о спектроскопии и спектрах. Взаимодействие вещества и энергии. Формула Планка. Энергетические уровни молекул.

Раздел «***Электронная спектроскопия***»

1. Характеристика ультрафиолетового и видимого излучения. Типы и характеристика электронных переходов в молекулах веществ: валентные молекулярные орбитали и энергетические переходы между ними.
2. Понятие об электронном спектре молекулы. Принцип Франка-Кондона.
3. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Принципиальная схема оптического спектрометра.
4. Спектральная характеристика $\sigma \rightarrow \sigma^*$ электронных переходов в молекулах.
5. Спектральная характеристика $n \rightarrow \sigma^*$ электронных переходов в молекулах.
6. Спектральная характеристика $\pi \rightarrow \pi^*$ электронных переходов в молекулах.
7. Спектральная характеристика $n \rightarrow \pi^*$ электронных переходов в молекулах.
8. Особенности электронной спектроскопии непредельных соединений: алкенов, алкинов, сопряженных диенов и диинов.
9. Особенности электронной спектроскопии карбонилсодержащих веществ: альдегидов, кетонов, карбоновых кислот.
10. Особенности электронной спектроскопии аренов и гетероаренов.
11. Особенности электронной спектроскопии сопряженных еноновых соединений.
12. Метод Бенеши-Гильдебранда для определения константы устойчивости комплекса с переносом заряда.
13. Определение состава многокомпонентной смеси по электронным спектрам поглощения.
14. Хромофоры и ауксохромы. Правила Вудворда. Влияние сопряжения на спектральные характеристики хромофора.
15. Основные характеристики полос поглощения, отклонение от выполнимости закона Бугера-Ламберта-Бера.
16. Органические и неорганические хромофоры.
17. Электронная спектроскопия координационных соединений. d-d – переходы в спектрах свободных ионов и комплексов переходных металлов.
18. Спектрохимический и нефелоксетический ряды ионов и лигандов. Энергия расщепления в поле лиганда.
19. Влияние структуры комплекса на спектр d-d – переходов (число и интенсивность полос).
20. Интерпретация электронных спектров поглощения комплексных соединений переходных металлов с помощью диаграмм Оргела и Танабо-Сугано (зависимости энергии ионных термов от параметра Δ_0 расщепления в поле лигандов).

Раздел «***Инфракрасная спектроскопия***»

1. Характеристика инфракрасного излучения. Колебательная модель двухатомной молекулы. Колебания многоатомных молекул: степени свободы и нормальные колебания. Валентные и деформационные колебания. Интенсивность линий поглощения в инфракрасной спектроскопии.
2. Колебательная энергия гармонического и ангармонического осцилляторов. Правила отбора в колебательной спектроскопии: основные переходы и обертоны.
3. Особенности инфракрасной спектроскопии алканов и циклоалканов.
4. Особенности инфракрасной спектроскопии алкенов.
5. Особенности инфракрасной спектроскопии алкинов.
6. Особенности инфракрасной спектроскопии аренов.

7. Особенности инфракрасной спектроскопии спиртов и простых эфиров.
8. Особенности инфракрасной спектроскопии альдегидов и кетонов
9. Особенности инфракрасной спектроскопии карбоновых кислот.
10. Особенности инфракрасной спектроскопии фенолов.
11. Особенности инфракрасной спектроскопии сложных эфиров карбоновых кислот.
12. Особенности инфракрасной спектроскопии нитрилов.
13. Особенности инфракрасной спектроскопии амидов карбоновых кислот.
14. Особенности инфракрасной спектроскопии ангидридов и галогенангидридов карбоновых кислот.
15. Особенности инфракрасной спектроскопии аминов.
16. Измерение толщины поглощающего слоя методом интерференции.
17. Проявления образования водородной связи в колебательных спектрах.

Раздел «***Спектроскопия комбинационного рассеяния***»

1. Физические принципы, лежащие в основе спектроскопии комбинационного рассеяния. Релеевское и Рамановское рассеяние. Интенсивность линий поглощения в спектроскопии комбинационного рассеяния.

Раздел «***Микроволновая (вращательная) спектроскопия***»

1. Характеристика микроволнового излучения. Физические принципы, лежащие в основе микроволновой (вращательной) спектроскопии. Теория вращательных спектров. Интенсивность линий поглощения в микроволновой спектроскопии.

Раздел «***Спектроскопия люминесценции***»

1. Сольватохромные эффекты в электронных спектрах поглощения и спектрах флуоресценции.
2. Природа цвета. Аддитивное и субстрактивное форомирование цвета.
3. Типы люминесценции. Природа флуоресценции и фосфоресценции.
4. Квантовый и энергетический выход свечения.
5. Закономерности молекулярной люминесценции (правила Стокса, Вавилова, зеркальной симметрии)
6. Органические люминофоры. Способы влияния на положения максимума эмиссии.
7. Металлорганические люминофоры, эффект тяжелого атома.
8. Определение квантовых выходов люминесценции методом сравнения.
9. Спектры возбуждения.
10. Принципиальная схема спектрометра для люминесцентной спектроскопии.

Раздел «***Ядерный магнитный резонанс***»

1. Магнитные свойства ядер атомов. Условия регистрации явления ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Поведение протона в магнитном поле. Основное уравнение ЯМР.
2. Блок-схема спектрометра ядерного магнитного резонанса (ЯМР). ЯМР с Фурье преобразованием. Условия подготовки образцов для ЯМР (растворитель, концентрация вещества, внутренний стандарт).
3. Понятие о химическом сдвиге в спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Стандарты для измерения химического сдвига в ЯМР.
4. Шкала химических сдвигов в спектроскопии ЯМР ^{1}H. Структурные факторы в молекулах, определяющие химические сдвиги протонов в них: индуктивный и анизотропный эффекты заместителей.
5. Спин-спиновое взаимодействие в спектроскопии ЯМР ^{1}H: мультиплетность сигналов, относительная интенсивность сигналов внутри мультиплетов (правило треугольника Паскаля).
6. Зависимость констант спин-спинового взаимодействия в ЯМР ^{1}H от строения веществ. Кривая Карплуса-Конроя.

7. Основные типы спиновых систем в ЯМР ^{1}H: а) AX; б) AX_2; в) AX_3; г) AX_6; д) A_2X_2; е) A_2X_3. Приведите примеры структурных фрагментов молекул, отвечающих этим спиновым системам.
8. Спектроскопия ЯМР ^{13}C: шкала химических сдвигов, влияние индуктивного и анизотропного эффекта заместителей на величину химического сдвига, мультиплетность сигналов.
9. Методы двумерой спектроскопии ЯМР: корреляционная спектроскопия (^{1}H-^{1}H COSY, ^{1}H-^{13}C COSY), ядерный эффект Оверхаузера (NOESY).
10. Особенности спектроскопии ЯМР ^{1}H и ^{13}C непредельных соединений алкенов, алкинов и алленов.
11. Особенности спектроскопии ЯМР ^{1}H и ^{13}C ароматических соединений.
12. Особенности спектроскопии ЯМР ^{1}H и ^{13}C карбонилсодержащих соединений: альдегидов, кетонов, карбоновых кислот, сложных эфиров и амидов карбоновых кислот.
13. Особенности спектроскопии ЯМР ^{1}H соединений, содержащих активный атом водорода: спиртов, фенолов, аминов, карбоновых кислот, амидов карбоновых кислот.

Раздел «***Электронный парамагнитный резонанс***»

1. Поведение электрона в магнитном поле. Основное уравнение электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Объекты, регистрируемые методом ЭПР. Вид сигнала в ЭПР.
2. Понятие о сверхтонком взаимодействии в спектроскопии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Мультиплетность сигналов в спектрах ЭПР. Изобразите спектры ЭПР метильного радикала $H_3C^{\bullet}$ и катион-радикала бензола $C_6H_6^{+\bullet}$.

Раздел «***Масс-спектрометрия***»

1. Определение метода масс-спектрометрии. Типы ионизации молекул: электронный удар, химическая ионизация, бомбардировка ускоренными атомами, электроспрей ионизация, матричная лазерная десорбционная ионизация.
2. Принципиальная схема масс-спектрометра. Уравнение движения заряженной частицы в магнитном поле.
3. Масс-спектрометрия с электронным ударом: типы образующихся ионов, анализ области пика молекулярного иона и изотопные пики, распад молекулярных ионов.
4. Основные закономерности фрагментации органических веществ в масс-спектрометрии с электронным ударом. Перегруппировка Мак-Лафферти.
5. Особенности масс-спектрометрии с электронным ударом галогенсодержащих веществ.
6. Особенности масс-спектрометрии с электронным ударом непредельных соединений алкенов, алкинов, аренов.
7. Особенности масс-спектрометрии с электронным ударом карбонилсодержащих соединений: альдегидов, кетонов, карбоновых кислот, сложных эфиров и амидов карбоновых кислот.
8. Особенности масс-спектрометрии с электронным ударом спиртов и аминов.