

## Оценочные материалы для промежуточной аттестации по дисциплине

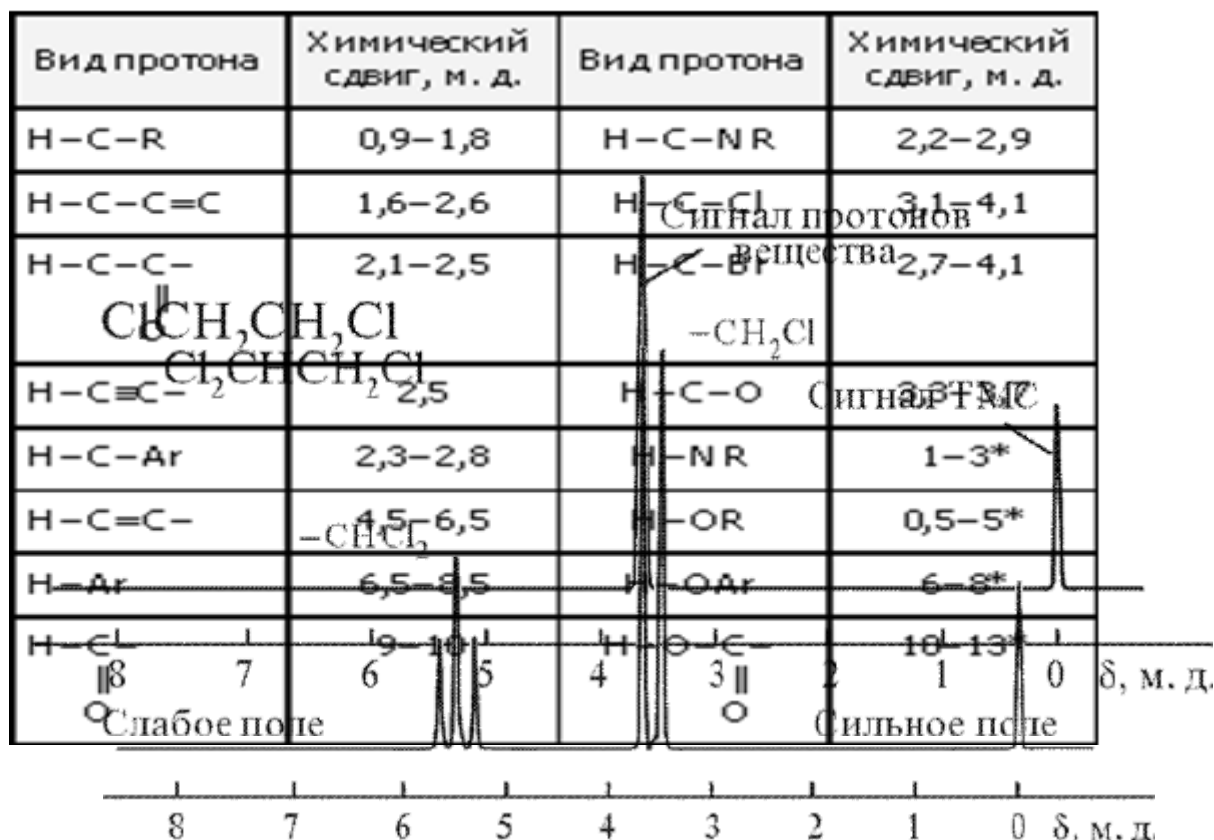
### Физические методы исследования

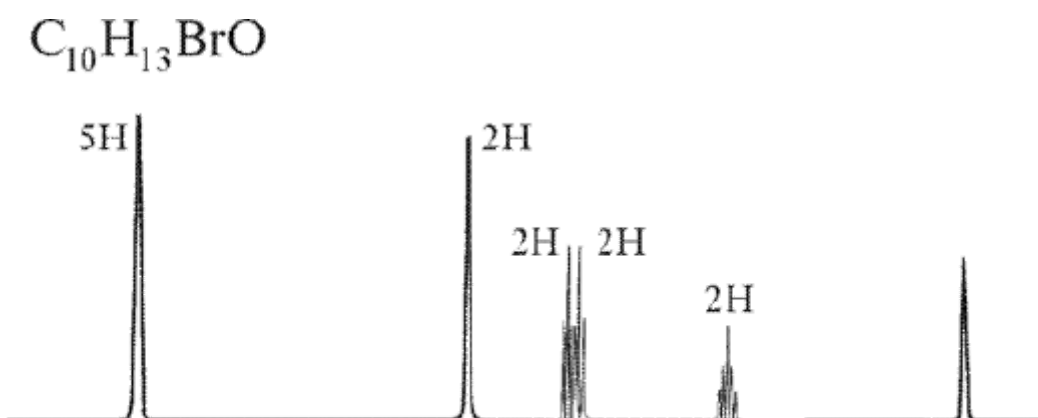
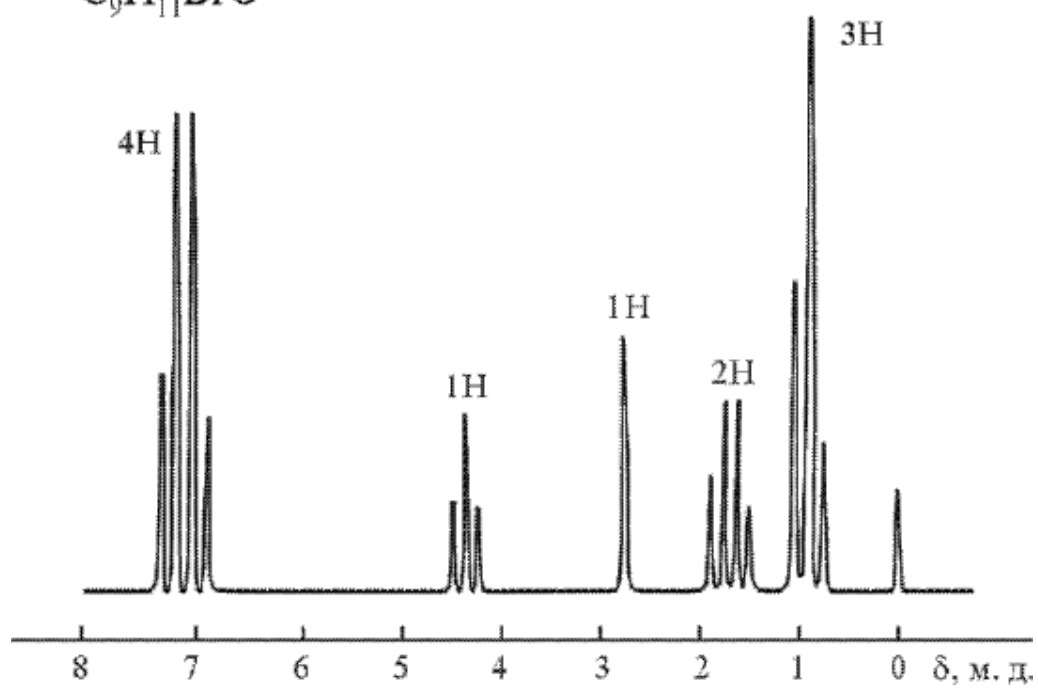
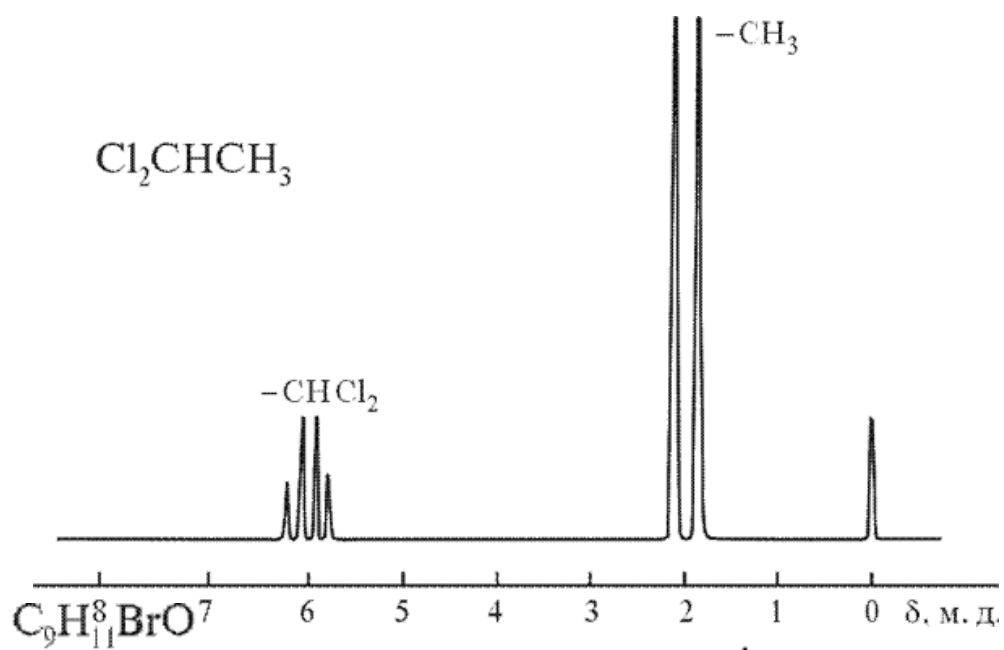
|                             |                                              |
|-----------------------------|----------------------------------------------|
| Код, направление подготовки | 04.05.01, Фундаментальная и прикладная химия |
| Направленность (профиль)    | Аналитическая химия                          |
| Форма обучения              | очная                                        |
| Кафедра-разработчик         | Химии                                        |
| Выпускающая кафедра         | Химии                                        |

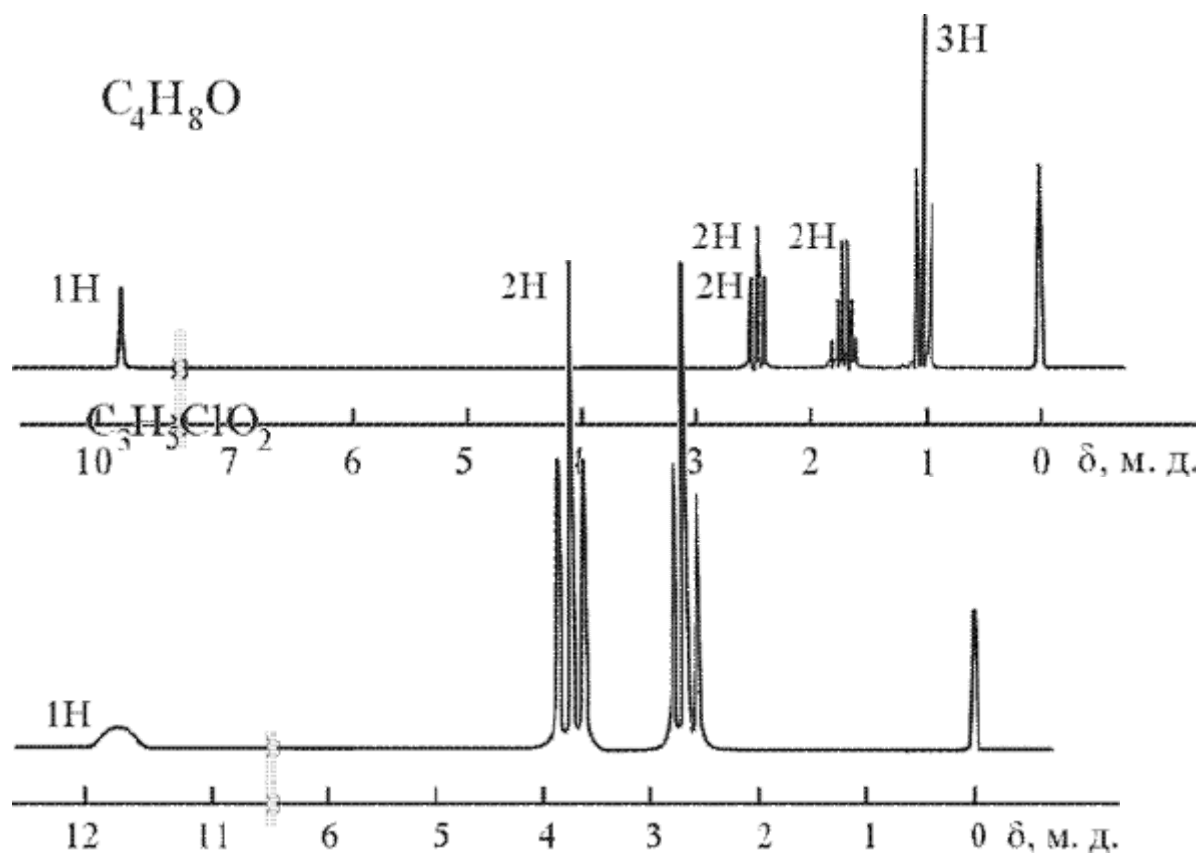
Типовые задания для контрольной работы:

Пользуясь информацией из таблицы, проанализировать и интерпретировать спектры протонного магнитного резонанса ПМР, представленные на рисунках.

Нарисовать структурные формулы веществ по их ПМР спектрам и брутто-формулам.







Типовые вопросы к экзамену:

1. История, основные понятия и определения. Теоретические основы физических методов исследования

Физические модели атомов и молекул. Методы определения физических свойств. Физическая теория метода. Прямая и обратная задачи. Понятие корректно и некорректно поставленных задач в математике.

Общая характеристика и классификация физических методов. Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы. Энергетические характеристики различных методов. Чувствительность и разрешающая способность метода. Характеристическое время метода.

## **2. Термические методы анализа**

Основные термические методы анализа и характеристики вещества, которые определяют с их использованием. Принципы методов и схематическое устройство приборов для термических исследований. Дифференциальный и синхронный термический анализ. Эндотермические и экзотермические процессы и эффекты. Дериватография и дериватограммы. Топохимические реакции и их исследование. Кинетические характеристики процессов. Аррениусовы координаты, определение порядка реакции и энергии активации процесса. Внешний вид дериватограммы, расчеты и характеристики химических реакций при термическом разложении вещества (на примере оксалата кальция). Области применения термических методов.

## **3. Спектроскопические (спектрометрические) методы анализа**

Оптический диапазон электромагнитного спектра. Спектральные методы анализа и их классификация. Энергетические диаграммы, иллюстрирующие спектральные процессы. Эмиссионная и абсорбционная атомная спектроскопия. Пламенная и электротермическая атомизация. Качественный и количественный спектральный анализ. Закон Бугера-Ламберта-Бера.

## **4. Молекулярная спектроскопия**

Энергия молекул и ее составляющие. Диаграмма энергетических уровней молекулы и демонстрация возможных переходов, сопровождаемых спектральными эффектами. Рассеяние и поглощение света. Типы переходов. Связь между энергией перехода, длиной волны и частотой излучения и волновым числом. Качественный и количественный молекулярный спектральный анализ. Основной закон светопоглощения. Характеристическое поглощение. Хромофоры и ауксохромы. Батохромный и гипсохромный сдвиги, гиперхромный и гипохромный эффекты. Колебательная спектроскопия. Типы колебаний. Валентные и деформационные колебания. Техника получения спектров поглощения. Метод нарушенного полного внутреннего отражения. Области применения методов молекулярной спектроскопии.

## **5. Масс-спектрометрия и хроматомасс-спектрометрия**

Основные принципы и процессы, положенные в основу масс-спектральных методов исследования. Исторические сведения о создании и создателях метода масс-спектрометрии.

Методы ионизации в масс-спектрометрии: электронный удар, фотоионизация, неоднородное электрическое поле, химическая ионизация. Комбинированные методы. Типы ионов в масс-спектрах.

Принципиальная схема масс-спектрометра Демпстера. Действие однородного магнитного поля. Разрешающая сила масс-спектрометра. Ионный источник масс-спектрометра. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр. Спектрометр ион-циклотронного резонанса.

Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Роль разрешения, потенциалов появления, методов ионизации. Таблицы массовых чисел. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами.

#### **6. Методы определения электрических дипольных моментов молекул**

Методы определения электрических дипольных моментов. Взаимодействие полярной молекулы с электростатическим полем. Ориентационная поляризация и ее связь с диэлектрической проницаемостью и дипольным моментом молекул. Уравнение Дебая для линейной молекулы или жесткого диполя.

Метод молекулярных пучков определения электрических дипольных моментов молекул. Дефокусировка и смещение молекулярного пучка в неоднородном электрическом поле. Метод электрического резонанса.

#### **7. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Мессбауэровская спектроскопия.**

Метод ЯМР. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса.

Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, число компонент мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Анализ спектров ЯМР. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Блок-схема спектрометра ЯМР.

Метод ЭПР. Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Условие ЭПР. g-фактор и его значение. Приложение метода ЭПР в химии. Изучение механизмов химических реакций. Определение свободных радикалов и других парамагнитных центров. Блок-схема спектрометра ЭПР. Достоинства и ограничения метода.

Мессбауэровская спектроскопия.  $\gamma$ -Резонансная ядерная флуоресценция, эффект Мессбауэра. Энергия испускаемых и поглощаемых  $\gamma$ -квантов. Доплеровское уширение и энергия отдачи. Процедура получения  $\gamma$ -резонансных спектров. Инструментальное оформление, блок-схема Мессбауэровского спектрометра. Химический (изомерный) сдвиг, влияние химического окружения. Возможности  $\gamma$ -резонансной спектроскопии в химии и ограничения ее применения.

#### **8. Фотоэлектронная спектроскопия**

Фотоэлектронная спектроскопия (ФЭС) и близкие к ней методы. Понятие электронного спектра. Классификация методов фотоэлектронной спектроскопии. Схема электронного спектрометра. Источники возбуждения в фотоэлектронной спектроскопии. Детекторы излучения. Фотоэффект. Уравнение Эйнштейна. Энергия связи фотоэлектронов. Работа выхода электрона. Качественный анализ. Спектры основных уровней в РФЭС. Тонкая структура рентгеновских фотоэлектронных линий. Количественный анализ. Оже-электронная спектроскопия. Принципы и область использования. Сравнение метрологических характеристик методов электронной спектроскопии.

#### **9. Ядерно-физические методы**

Ядерно-физические методы. Классификация методов. Активационные методы анализа. Области применения. Инструментальные и радиохимические варианты методов. Метрологические характеристики различных активационных методов.