

1. РАДИОСПЕКТРОСКОПИЯ

1.1. Магнитные моменты электронов и ядер. Гиромагнитное отношение для ядер и электронов. g-фактор. Магнетон Бора и ядерный магнетон.

2.2. Спин в постоянном магнитном поле. Эффект Зеемана. Поглощение энергии электромагнитного поля системой спинов. ЭПР и ЯМР: диапазоны постоянных магнитных полей и резонансных частот.

2.3. Правила отбора в спектроскопии ЯМР. Константа экранирования. Химический сдвиг протонов и тяжелых ядер. Эталонные соединения. Мультиплетность сигналов ЯМР.

2.4. Спин-спиновое взаимодействие и мультиплетность сигналов ЯМР. Константа спин-спинового взаимодействия. Химический сдвиг.

2.5. Мультиплетность сигналов в ЯМР. Химический обмен. Вид спектра ЯМР в условиях быстрого и медленного обмена.

2.6. Принципиальная схема ЯМР-спектрометра. Требования к напряженности и однородности постоянного магнитного поля. Способы минимизации аппаратного уширения линий.

2.7. Интенсивность и ширина линий в спектрах ЯМР. Понятие о продольной (спин-решеточной) и поперечной (спин-спиновой) релаксации.

2.8. Импульсные методы ЯМР. 90° и 180° импульсы. Фурье-ЯМР спектроскопия. Измерение времен продольной и поперечной релаксации.

2.9. Спектроскопия ЭПР. Сверхтонкая структура спектра ЭПР. Структурные и динамические характеристики вещества, определяемые методом ЭПР.

2.10. Принципиальная схема ЭПР-спектрометра. Особенности регистрации сигналов ЭПР: волноводы и резонаторы, низкочастотная модуляция магнитного поля и запись спектров в виде производной.

2.ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

3.1. Поглощение и рассеяние электромагнитного излучения веществом. Закон Бугера-Ламберта-Бэра. Приближение Борна-Оппенгеймера.

3.2. Поглощение, испускание и рассеяние электромагнитного излучения в различных спектральных диапазонах. Спектроскопия поглощения, испускания и рассеяния света. Приближение Борна-Оппенгеймера.

3.3. Колебательная спектроскопия. Приближение Борна-Оппенгеймера. Модели гармонического и ангармонического осциллятора. Интерпретация колебательных спектров.

3.4. Колебательно-вращательные переходы в двухатомной молекуле. Приближение Борна-Оппенгеймера. Правила отбора в колебательной спектроскопии, в колебательно-вращательной спектроскопии.

3.5. Электронные переходы. Электронно-колебательно-вращательные спектры. Приближение Борна-Оппенгеймера. Принцип Франка-Кондона. Правила отбора при электронно-колебательно-вращательных переходах. Диссоциативный предел спектра. Определение энергии диссоциации.

3.6. Техника эксперимента, особенности установок при получении абсорбционных и эмиссионных спектров, а также Фурье-спектроскопии. Каковы преимущества Фурье-спектрометров перед приборами с диспергирующими элементами?

3.7. Оценка температуры вещества по его спектрам. Доплеровское уширение. Опишите, какие изменения в колебательно-вращательных спектрах поглощения происходят при повышении температуры.

3.8. Что такое абсолютно черное тело, какими параметрами оно характеризуется? Пирометрические методы измерения температуры. Цветовая, яркостная температуры. Схема пирометров.

3.9. Принципиальные различия флуоресценции и фосфоресценции. Диаграмма Яблонского. Принцип Франка-Кондона. Внутренняя и интеркомбинационная конверсия. Стоксов сдвиг максимумов спектров поглощения и флуоресценции. Динамическое и статическое тушение флуоресценции.

3.10. Достоинства и недостатки спектрофотометрии и флуоресцентной спектроскопии для определения концентрации. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Принципиальные различия флуоресценции и фосфоресценции. Диаграмма Яблонского. Принцип Франка-Кондона.

3.11. Спектральные методы исследования свойств вещества. Предложите способы экспериментального определения вращательных постоянных двухатомных молекул и энергии диссоциации для гомо- и гетероядерных молекул.

3.12. Основные закономерности рассеяния света малыми частицами: зависимость интенсивности рассеянного излучения от размера частиц, длины волны света, угла рассеяния. Принцип определения размеров наночастиц с помощью динамического рассеяния света.

3. ХРОМАТОГРАФИЯ

4.1. Физическая и химическая адсорбция. Адсорбционно-десорбционное равновесие. Изотермы адсорбции. Изотермы Ленгмюра, Генри, полислойной адсорбции.

4.2. Кинетика адсорбции-десорбции в потоке газа-носителя. Концепция теоретических тарелок. Закон распределения Нернста. Ширина и форма хроматографического пика. Разрешающая способность хроматографической колонки.

4.3. Оптимальные размеры и разрешение хроматографической колонки. Зависимость времени удерживания молекулы в хроматографической колонке от температуры. Хроматография с программируемым нагревом.

4.4. Принципиальное устройство и принцип работы газового хроматографа. Набивные и капиллярные хроматографические колонки, их параметры. Детекторы.

4.5. Жидкостная хроматография. Градиентное элюирование. Устройство жидкостного хроматографа. Детекторы в жидкостной хроматографии.

4. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ

5.1. Метод масс-спектрометрического анализа. Единицы измерения массы: а.е.м., Дальтон, Томсон. Блок-схема масс-спектрометра. Масс-спектр. Аналитические характеристики масс-спектрометра: точность измерения масс, разрешающая способность, динамический диапазон, порог детектирования, чувствительность.

5.2. Методы ионизации: ионизация электронным ударом, химическая ионизация, фотоионизация, полевая ионизация, полевая десорбция, бомбардировка быстрыми атомами, матричная лазерная ионизация десорбцией (MALDI), электроспрей. Молекулярные, осколочные, квазимолекулярные ионы. Метастабильные ионы.

5.3. Физические принципы деструктивного и недеструктивного детектирования ионов. Устройства для детектирования ионов: коллекторный детектор, коллекторный детектор с антидинаatronным электродом, цилиндр Фарадея, вторичный электронный умножитель, микроканальная пластина.

5.4. Схема времяпролетного и магнитостатического масс-анализаторов. Чем определяется разрешающая способность этих анализаторов?

ЛИТЕРАТУРА

1. Тейлор Дж. Введение в теорию ошибок. – М.: Мир, 1985.
2. Максимычев А.В. Физические методы исследования. 1. Погрешности измерений. Учебно-методическое пособие. /М.: МФТИ, 2006.
3. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М., Мир, 2003.
4. Драго Р. Физические методы в химии. Т. 1,2. М.: Мир, 1981.
5. Вертц Дж., Болтон Дж. Теория и практические приложения метода ЭПР. М: Мир, 1975.
6. Устынюк Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Часть 1 (вводный курс). М.: Техносфера, 2016.
7. Воловенко Ю.М., Карцев В.Г., Комаров И.В., Туров А.В., Хиля В.П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. М.: МБФНП, 2011.

8. Максимычев А.В. Ядерный магнитный резонанс высокого разрешения. Лабораторная работа. /М.: МФТИ, 2006.
9. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. М: Мир, 1985.
10. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: КомКнига, 2006.
11. Лебедева В.В. Экспериментальная оптика. М.: Изд-во МГУ, 1999.
12. Ткаченко С.И., Калинин Ю.Г., Куксин А.Ю. Исследование вещества по его излучательно – поглотительным характеристикам. Основные положения. Учебно-методическое пособие. М.: МФТИ, 2012. 46 с.
13. Ткаченко С.И. Исследование вещества по его излучательно – поглотительным характеристикам. Молекулярные спектры. Учебно-методическое пособие. М.: МФТИ, 2012. 48 с.
14. Максимычев А.В. Газо-адсорбционная хроматография: учебно-методическое пособие. М.: МФТИ, 2009.
15. Жуховицкий О.А. Основы жидкостной хроматографии. М.: Мир, 1973.
16. Сысоев А.А., Чупахин М.С. Введение в масс-спектрометрию. М., Атомиздат, 1977.
17. Грошковский Я. Техника высокого вакуума. М.: Мир, 1975.
18. Попов И.А., Кукаев Е.Н., Куксин А.Ю. Газовый анализ с использованием квадрупольного масс-спектрометра: лабораторная работа. М.: МФТИ, 2012.
19. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды. М.: Техносфера, 2013.
20. Сердюк И., Заккаи Н., Заккаи Дж. Методы в молекулярной биофизике. Структура, функция, динамика. КДУ, 2009.