

## Вопросы к экзамену по курсу «Физические методы в химии», 411 группа, осень 2004

### Билет № 1.

1. Общая характеристика физических методов исследования.
2. Решение классической задачи о малых колебаниях многоатомной молекулы. Нормальные колебания и нормальные координаты.

### Билет № 2.

1. Ионные источники в масс-спектрометрии. Определение потенциалов ионизации и энергии разрыва химических связей.
2. Физические принципы и применения спектроскопии ЭПР.

### Билет № 3.

1. Схема масс-спектрометра Демпстера. Другие типы масс-спектрометров и их возможности.
2. Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров многоатомных молекул (частоты и интенсивности).

### Билет № 4.

1. Применение масс-спектрометрии: идентификация ионов и веществ, установление химического строения.
2. Симметрия нормальных колебаний. Координаты симметрии. Правила отбора в ИК и КР спектрах.

### Билет № 5.

1. Вывод уравнения Дебая. Первый и второй методы Дебая определения электрических дипольных моментов молекул.
2. Физические принципы спектроскопии ЯМР. Химический сдвиг и спин-спиновые взаимодействия.

### Билет № 6.

1. Эффект Штарка для линейных молекул и молекул типа симметричного волчка.
2. Метод мессбуаэровской спектроскопии и его возможности.

### Билет № 7.

1. Метод молекулярных пучков для определения электрических дипольных моментов молекул.
2. Обратная колебательная задача, пути её решения. Модели силовых полей молекулы.

### Билет № 8.

1. Определение дипольного момента молекул из вращательных микроволновых спектров. Схема эксперимента.
2. Методы рентгеновской и фотоэлектронной спектроскопии. Физические принципы, возможности, применения.

### Билет № 9.

1. Определение геометрии молекул на основе вращательных спектров в микроволновой области. Схема эксперимента.
2. Динамический ЯМР. Множественный резонанс. Химическая поляризация ядер и электронов.

### Билет № 10.

1. Физический смысл параметров  $r_e$ ,  $r_0$ ,  $r_z$ ,  $r_s$ ,  $r_g$ .
2. Метод спектроскопии ЯКР и его возможности.

### Билет № 11.

1. Определение геометрии молекул из чисто вращательных спектров КР.

2. Спектроскопия НПВО, принципы и возможности.

**Билет № 12.**

1. Схема и условие эксперимента в газовой электронографии. Методы расшифровки электронограмм.
2. Люминесцентная спектроскопия: принципы и возможности.

**Билет № 13.**

1. Основы теории рассеяния электронов атомами и молекулами.
2. Анализ нормальных колебаний и определение симметрии молекул с использованием экспериментальных данных по ИК и КР спектрам.

**Билет № 14.**

1. Условия совместного анализа данных электронографии и вращательной микроволновой спектроскопии.
2. Спектроскопия КР: техника, методики, нелинейные эффекты резонансного КР.

**Билет № 15.**

1. Метод дисперсии оптического вращения.
2. Изучение внутреннего вращения и поворотной изомерии методами оптической, микроволновой и радиоспектроскопии (ЯМР, ЭПР).

**Билет № 16.**

1. Метод кругового дихроизма.
2. Возможности определения структуры молекул методами оптической и радиоспектроскопии (ЯМР, ЭПР).

**Билет № 17.**

1. Определение абсолютной конфигурации методом аномального рассеяния рентгеновских лучей.
2. Электронные состояния двухатомных и многоатомных молекул. Их классификация и основные характеристики.

**Билет № 18.**

1. Определение главных значений поляризуемости молекул на основе данных поляризации релеевского рассеяния и эффекта Керра.
2. Классификация и отнесение электронных переходов. Правила отбора по спину и орбитальной симметрии. Вибронный фактор.

**Билет № 19.**

1. Использование эффекта Фарадея в химии.
2. Общая характеристика спектральных и дифракционных методов.

**Билет № 20.**

1. Использование преобразования Фурье в газовой электронографии.
2. Определение типа симметрии электронного состояния многоатомной молекулы по полной электронной волновой функции в приближении МО ЛКАО.

**Билет № 21.**

1. Применение масс-спектрометрии в термодинамических и кинетических исследованиях.
2. Техника методов ИК и УФ спектроскопии. Фурье-спектроскопия.