

**Вопросы для подготовки к экзамену по дисциплине
«Инструментальные методы анализа органических соединений»
для студентов 2-го курса ИХПБД и ТБ**

Раздел «Электронная спектроскопия»

1. Что изучает электронная спектроскопия органических соединений?
2. Дайте определения понятиям «спектроскопия» и «спектр».
3. В каком диапазоне λ (нм) регистрируют электронные спектры?
4. Почему спектры в ультрафиолетовой и видимой областях называют электронными?
5. Представьте принципиальную схему устройства спектрофотометра. Какова функция монохроматора?
6. Как соотносятся между собой электронная, колебательная и вращательная энергии молекулы?
7. Приведите основные типы электронных переходов в молекулах органических веществ. Какие из них требуют наибольшей и наименьшей энергии?
8. Дайте определения понятиям «хромофор» и «ауксохром».
9. Дайте определение понятиям «оптическая плотность» и приведите формулировку закона Бугера-Ламберта-Бера.
10. Что такое « ϵ » [молярный коэффициент экстинкции (поглощения)]?
11. Почему электронный спектр представляют в форме зависимости $\epsilon = f(\lambda)$?
12. Каковы основные характеристики электронного спектра и электронного перехода?
13. Что такое гипсохромный сдвиг и гипсохромный эффект?
14. Что такое батохромный сдвиг и гиперхромный эффект?
15. Чем обусловлены изменения λ_{max} при переходе от алкенов к сопряженным диенам?
16. Чем обусловлены изменения λ_{max} при переходе от диалкилкетонов к кетонам, где карбонильная группа сопряжена с двойной связью углерод-углерод?
17. Что такое тонкая структура сигнала поглощения в электронном спектре?
18. Что такое изобестическая точка в электронном спектре?
19. Приведите характерные значения λ_{max} (нм) и ϵ в рядах:
 - а) алканов,
 - б) галогеналканов,
 - в) аминов,
 - г) тиолов,
 - д) алкенов и алкинов,
 - е) сопряженных полиеновых хромофоров,
 - ж) монозамещенных бензолов,
 - з) полициклических ароматических углеводородов,
 - и) гетероциклических ароматических соединений.
20. Приведите характеристики (интервалы λ_{max} (нм) и значения ϵ) следующих электронных переходов:
 - а) $\sigma \rightarrow \sigma^*$; б) $n \rightarrow \sigma^*$; в) $\pi \rightarrow \pi^*$; г) $n \rightarrow \pi^*$.
21. Приведите структуры органических соединений пяти различных классов, для которых характерен $n \rightarrow \sigma^*$ переход.
22. Приведите структуры органических соединений пяти различных классов, для которых характерен $\pi \rightarrow \pi^*$ переход.
23. Приведите структуры органических соединений пяти различных классов, для которых характерен $n \rightarrow \pi^*$ переход.

Раздел «Инфракрасная спектроскопия»

24. Что является физической причиной характерности полос в ИК-спектрах?

25. Что такое валентные и деформационные колебания?
26. В каком диапазоне волновых чисел ν (см^{-1}) регистрируют ИК-спектры?
27. Представьте принципиальную схему устройства ИК-спектрометра.
28. Гармонический осциллятор. Колебательная энергия и частота колебаний гармонического осциллятора.
29. Ангармонический осциллятор. Колебательная энергия ангармонического осциллятора.
30. Теоретический расчет частот валентных колебаний. Формула расчета ν (см^{-1}) для валентных колебания отдельных связей в молекулах органических соединений.
31. Что такое силовая постоянная связи и что она характеризует? Каковы средние значения силовых постоянных для простой, двойной и тройной связей?
32. Где в ИК-спектрах проявляются валентные (ν) и деформационные (δ) колебания: а) алкильных групп $-\text{CH}_3$, $-\text{CH}_2-$; б) гидроксильных групп $\text{O}-\text{H}$.
33. Дайте интервалы валентных и деформационных колебания для связей: $\text{X}-\text{H}$, $\text{X}=\text{Y}$, $\text{X}\equiv\text{Y}$, $\text{X}-\text{Y}$.
34. Условия подготовки образцов и регистрации ИК-спектров.
35. Какие задачи можно решать с помощью ИК-спектроскопии.
36. Дайте определения понятиям: основная частота, нормальные колебания, первый обертона, второй обертона, силовая постоянная связи.
37. Колебания каких связей в молекулах органических соединений проявляются с высокой интенсивностью? Приведите примеры таких связей.
38. Инфракрасная спектроскопия алканов. Укажите области валентных и деформационных колебаний соответствующих связей.
39. Инфракрасная спектроскопия алкенов. Укажите области валентных и деформационных колебаний соответствующих связей.
40. Инфракрасная спектроскопия алкинов. Укажите области валентных и деформационных колебаний соответствующих связей.
41. Инфракрасная спектроскопия гидроксилсодержащих соединений (спиртов и фенолов). Укажите области валентных и деформационных колебаний соответствующих связей. Определение межмолекулярных и внутримолекулярных водородных связей с помощью ИК-спектроскопии.
42. Инфракрасная спектроскопия алкилзамещенных ароматических углеводородов. Укажите основные области валентных и деформационных колебаний $\text{C}-\text{C}$ и $\text{C}-\text{H}$ связей.
43. Инфракрасная спектроскопия галогенбензолов, нитробензолов и ариламинов. Укажите области колебаний соответствующих связей.
44. Инфракрасная спектроскопия альдегидов. Укажите области колебаний соответствующих связей.
45. Инфракрасная спектроскопия кетонов. Укажите области колебаний соответствующих связей.
46. Инфракрасная спектроскопия карбоновых кислот и сложных эфиров. Укажите области колебаний соответствующих связей.
47. Инфракрасная спектроскопия азотсодержащих соединений (аминов, нитросоединений, нитрилов). Укажите области колебаний (валентных и деформационных) соответствующих связей.

Раздел «Масс-спектрометрия»

48. На чем основан метод масс-спектрометрии органических соединений.
49. Какие преимущества имеет метод масс-спектрометрии органических соединений.
50. Приведите уравнение, описывающее движение заряженной частицы в постоянном магнитном поле.
51. Типы ионов, возникающие при ионизации молекулы органического соединения методом электронного удара?
52. Как зависит интенсивность молекулярного иона от энергии ионизирующих электронов?
53. Какие методы ионизации вы знаете?
54. Какие методы разделения ионов вы знаете?

55. Какие методы детектирования ионов вы знаете?
56. Представьте устройство и принцип работы масс-спектрометра.
57. Азотное правило. Правило «формальной неопределенности».
58. Какую информацию можно извлечь из области пика молекулярного иона? Анализ области молекулярного иона для соединений, содержащих атомы углерода, серы, кислорода.
59. Масс-спектрометрия моногалогенсодержащих соединений. Как выглядит область пика молекулярного иона в масс-спектре хлорметана?
60. Масс-спектрометрия дигалогенсодержащих соединений. Как выглядит область пика молекулярного иона в масс-спектре дибромметана?
61. Как выглядит область пика молекулярного иона в масс-спектре галогенопроизводных, содержащих одновременно два и более различных галогенов?
62. Назовите общие правила фрагментации для различных классов соединений с использованием ионизации электронным ударом:
 - а) алканов; б) галогеналканов.
63. Назовите общие правила фрагментации для различных классов соединений с использованием ионизации электронным ударом:
 - а) спиртов; в) тиоспиртов.
64. Назовите общие правила фрагментации для различных классов соединений с использованием ионизации электронным ударом:
 - а) альдегидов; в) кетонов.
65. Приведите примеры перегруппировки Мак-Лафферти.
66. Напишите схему перегруппировки Мак-Лафферти в общем виде. Приведите пример.
67. Масс-спектрометрия фенолов и их простых эфиров. Основные пути фрагментации при ионизации указанных соединений электронным ударом.
68. Приведите основные пути масс-спектрометрического распада молекул карбоновых кислот и их производных.
69. Какие структуры могут иметь осколочный ион с m/z 43?
70. Назовите общие правила направления фрагментации для органических соединений в масс-спектрометрии с электронным ударом:
 - а) разрыв α - β связи соседней с гетероатомом;
 - в) разрыв C-C связи в аллильном (бензильном) положении;
 - г) разрыв α -связи в циклических системах.

Раздел «Ядерный магнитный резонанс»

71. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Ядра, каких химических элементов можно наблюдать методом ЯМР. Магнитно-эквивалентные ядра. Приведите основные уравнения ЯМР.
72. Блок-схема спектрометра ЯМР. Условия подготовки образцов (растворитель, концентрация вещества, внутренний стандарт).
73. Понятие о химическом сдвиге δ в спектроскопии протонного магнитного резонанса (ПМР).
74. Шкала химических сдвигов.
75. Спектроскопия протонного магнитного резонанса (ПМР). Понятие о спин-спиновом взаимодействии. Константа спин-спинового взаимодействия J . Определение относительных интенсивностей сигналов в мультиплетах с помощью треугольника Паскаля.
76. Спектроскопия протонного магнитного резонанса (ПМР). Приведите примеры фрагментов молекул органических соединений, отвечающих спиновой системе:
 - а) AX; б) AX₂; в) AX₃; г) AX₆; д) A₂X₂; е) A₂X₃.
 Объясните мультиплетность и интенсивность сигналов.
77. Спектроскопия протонного магнитного резонанса (ПМР). Эффекты экранирования и разэкранирования протонов в спектрах ПМР алканов, алкенов, алкинов.

78. Спектроскопия протонного магнитного резонанса органических соединений, содержащих активный водород (спиртов, аминов, альдегидов, карбоновых кислот). При каких значениях хим. Сдвигов поглощают протоны гидроксильных групп спиртов, фенолов и карбоксильных групп.
79. Спектроскопия протонного магнитного резонанса производных бензола. Магнитная анизотропия бензольного кольца (эффект кольцевого тока). Понятие о разэкранировании ароматических протонов.
80. Изобразите спектры ЯМР ^1H п-ксилола (1,4-диметилбензола) и мезитилена (1,3,5-триметилбензола).
81. Изобразите спектр ЯМР ^1H нитропропана. Какие четыре параметра дают нам необходимую информацию для интерпретации спектра (химический сдвиг, интегральная кривая, мультиплетность сигналов, константа спин-спинового взаимодействия)?
82. Изобразите спектры ЯМР ^1H бромэтана и этанола.
83. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на ядрах углерода ^{13}C . Диапазон химических сдвигов ядер.
84. Области поглощения ядер ^{13}C углеводородов (алканов, алкенов, алкинов, спиртов, кетонов, карбоновых кислот и их производных).

Раздел «Хроматография»

85. Дайте классификацию современных хроматографических методов анализа.
86. Расскажите о методе газовой хроматографии.
87. Расскажите о методе жидкостной хроматографии.
88. Расскажите о методе тонкослойной хроматографии.
89. Качественный анализ органических и природных соединений хроматографическими методами.
90. Количественный анализ органических и природных соединений хроматографическими методами.