

# Програм колоквијума и литература за колоквијуме из Молекулске спектроскопије, шк. 2020/2021

## I колоквијум

### **ЕЛЕКТРОНАСКА СПЕКТРОСКОПИЈА**

Врста молекулских кретања и односи енергија тих кретања. Области, подручја, енергије и облици јављања молекулских спектра. Моменти прелаза и правила избора. Хромофоре, ауксохроме и антиауксохроме, дефиниција. Типови спектралних прелаза органских молекула ( $\sigma$ - $\sigma^*$ ,  $\pi$ - $\pi^*$ ,  $n$ - $\sigma^*$ ,  $n$ - $\pi^*$  прелази). Утицај природе супституената на спектрално понашање једноставнијих хромофорних система са  $\pi$ - $\pi^*$  и  $n$ - $\pi^*$  прелазима. Солвентохромија и солватохромија у молекулским спектрима једноставнијих хромофорних система са  $\pi$ - $\pi^*$  и  $n$ - $\pi^*$  прелазима. Изосбестна тачка, значај. Електронтрансферски (Е-Т) прелази. Примена SEMO теорије на линеарне делокализоване  $\pi$ -електронске системе (израчунавање  $\lambda_{\max}$ ). Аналитичка примена Беровог закона, квантитативна спектрофотометријска анализа једнокомпонентних и вишекомпонентних система. Врсте и типови спектрофотометара, принципијелне схеме, битне карактеристике.

## II колоквијум

### **ВИБРАЦИОНА СПЕКТРОСКОПИЈА**

Вибрације и вибрациони (ИЦ) спектри двоатомских и вишеатомских молекула. Групне вибрације, основне карактеристике. Фактори утицаја на положај трака групних вибрација (електронски ефекти супституената, Фермијева резонанција, симетрија, изомерија, Н веза, ефекти поља ...). Примена ИЦ спектра у аналитичке сврхе, квалитативна и квантитативна ИЦ спектрометрија. Рамански спектри молекула, настајање, основне карактеристике, класично и квантно тумачење, примена. Могућности упоредне анализе ИЦ и раманских спектра, правило искључења. Врсте и типови FTIR и раманских спектрофотометара, принципијелне схеме, битне карактеристике.

## III колоквијум

### **РЕЗОНАНТНЕ СПЕКТРОСКОПСКЕ МЕТОДЕ (НМР, ЕПР)**

НМР спектрометрија, битне карактеристике, примена. Најважније карактеристике НМР спектра (хемијски померај, фина структура, интензитет). Типови спрезања у спинским системима различитог типа. Анализа НМР спектра простијих органских једињења.

ЕПР спектрометрија, битне карактеристике, примена. Сличности и разлике НМР и ЕПР спектра. Најважније карактеристике ЕПР спектра (положај спектра, хиперфина и фина структура, интензитет). Анализа ЕПР спектра простијих радикала.

Експерименталне технике добијање НМР и ЕПР спектра, принципијелне схеме, битне карактеристике.

### **Полагање колоквијума:**

1. Усмено (без рачунског задатка), у случају одржавња наставе на даљину.
2. У случају држања наставе у регуларним условима колоквијум садржи писмени део (рачунски задатак који је елиминаторан) и усмени део.

## I Колоквијум

### **Молекулска спектроскопија, спектхрохемијски аспект, А. Антић-Јовановић**

**Поглавље 1:** Увод (цело поглавље)

**Поглавље 2:** Интеракција електромагнетног зрачења и молекула супстанције.

Спектрални прелази

- поглавље 2.4.

**Поглавље 7:** Електронски спектри

- поглавља: 7.1.8 - 7.1.10.
- поглавље: 7.1.11(само прочитати); 7.1.12; 7.2.5; 7.2.5.1-7.2.5.8.

### **Практични аспекти одабраних поглавља молекулске спектхрохемије, Ј. Димитрић Марковић**

**Поглавље 1:** Увод у теорију молекулских спектра (цело поглавље)

**Поглавље 2:** Електронски спектри молекула гасова и пара (цело поглавље)

**Поглавље 3:** Електронски спектри органских молекула кондензованих система

- поглавља: 3.1; 3.2; 3.3; 3.4; 3.5 (увод); 3.5.1; 3.5.5; 3.5.6; 3.7.

## II Колоквијум

### **Молекулска спектроскопија, спектхрохемијски аспект, А. Антић-Јовановић**

**Поглавље 5:** Вибрациони спектри

- поглавља: 5.2.1.1; 5.2.1.2; 5.2.2 (без торзионих вибрације и инверзије); 5.2.3; 5.2.6; 5.2.6.1; 5.3; 5.3.1; 5.3.2 (само прочитати); 5.4.2.

**Поглавље 6:** Рамански спектри

- поглавља: 6.1; 6.1.1; 6.1.2; 6.1.3; 6.3.1; 6.3.2; 6.5; 6.6; 6.7; 6.8; 6.9; 6.11(само прочитати).

### **Практични аспекти одабраних поглавља молекулске спектхрохемије, Ј. Димитрић Марковић**

**Поглавље 6:** Вибрациони спектри молекула

- поглавља: 6.3; 6.4; 6.5; 6.6 (обавезно прочитати).

## III Колоквијум

### **Молекулска спектроскопија, спектхрохемијски аспект, А. Антић-Јовановић**

**Поглавље 9:** Спектри резонанције

- поглавља: 9.1.1; 9.1.2 (до мерења времена релаксације); 9.1.3; 9.1.3.1; 9.1.3.2; 9.1.3.3; 9.1.3.7; 9.1.3.9; 9.2; 9.2.1; 9.2.2; 9.2.2.1; 9.2.2.2; 9.2.2.3; 9.2.2.4; 9.2.2.5 (прочитати); 9.2.4.

### **Практични аспекти одабраних поглавља молекулске спектхрохемије, Ј. Димитрић Марковић**

**Поглавље 8:** Спектри нуклеарне магнетске резонанције

- поглавља: 8.1; 8.1.1; 8.2; 8.3; 8.4; 8.5; 8.5.1; 8.5.2; 8.5.2.1; 8.5.2.2; 8.5.2.3 (обавезно прочитати); 8.5.3; 8.6.

**Напомена:** Препорука је да се за спремање колоквијума користе наведени уџбеници. Како материјал у уџбеницима обрађује исту проблематику студентима се оставља слобода да бирају из ког ће уџбеника спремати материјал. У деловима где је неопходно користити одређени уџбеник то је наглашено.

**Напомена:** ПРЕЗЕНТАЦИЈУ КОЈЕ СЕ НАЛАЗЕ НА WEB СТРАНИЦИ ПРЕДМЕТА СУ НАМЕЊЕНЕ ИСКЉУЧИВА КАО ДОДАТНИ МАТЕРИЈАЛ ЗА ПОТРЕБЕ СПРЕМАЊА

**КОЛОКВИЈУМА И ИСПИТА И НИЈЕ ИХ ДОЗВОЉЕНО УМНОЖАВАТИ, ДЕЛИТИ И ОБЈАВЉИВАТИ ЈАВНО.** Важно је напоменути да спремање колоквијума и испита из презентација није довољно и да је неопходно учити и из горе наведених уџбеника. Студенти могу, уколико то желе, користити и другу доступну литературу.