

**Табела 5.2. Спецификација предмета**

<b>Студијски програм:</b> Мастер академске студије Физичка хемија			
<b>Назив предмета:</b> Магнетно-резонантне методе у физичкој хемији			
<b>Наставници:</b> Даковић Марко, Мојовић Милош			
<b>Статус предмета:</b> Изборни			
<b>Број ЕСПБ:</b> 7			
<b>Услов:</b> Нема			
<b>Циљ предмета</b> Циљ предмета је да студент овлада основним и напредним методама нуклеарне и електронске парамагнетне резонантне (НМР и ЕПР) спектроскопије и обучи се како може да их искористи у свом научно-истраживачком раду из области физичке хемије.			
<b>Исход предмета</b> Студент познаје физички аспект НМР и ЕПР метода и упознат је са принципом рада НМР и ЕПР спектрометра. Студент је теоријски и практично овладао класичним и напредним методама НМР и ЕПР спектроскопије. Студент зна да интерпретира параметре НМР и ЕПР спектра. Студент зна где и на који начин може да примени НМР и ЕПР спектроскопију у физичкохемијским истраживањима.			
<b>Садржај предмета</b> <i>Теоријска настава</i> Основни појмови у НМР спектроскопији. Векторски и квантномеханички приступ. Интерпретација протонског спектра. НМР уређаји и обрада НМР сигнала. Механизми релаксације у НМР: спин-решетка и спин-спин релаксација. Молекулска динамика и НМР релаксација. <sup>13</sup> С спектроскопија. Нуклеарни Оверхаузер ефекат. НМР пулсне секвенције. Спин ехо. Трансфер поларизације. Дифузијски НМР. Хетеронуклеарна НМР спектроскопија. 2D НМР спектроскопија (COSY и TOCSY). Биолошка и <i>in vivo</i> НМР спектроскопија. Основни принципи електронске парамагнетне резонанције. Основни делови и принцип рада ЕПР спектрометра. Параметри за разумевање ЕПР феномена: магнетно поље, модулациона амплитуда, микроталасна снага, угаони и магнетни моменти, интеракција магнетних дипола и електромагнетног зрачења, карактеристике спинских система, <i>g</i> -фактор, хиперфина интеракција. ЕПР паралелног поља. Спински оператори и хамилтонијани. Земанова ( <i>g</i> ) и хиперфина ( <i>A</i> ) анизотропија. Системи са више неспарених електрона. ЕПР спектри јона прелазних метала. ЕПР спектри слободних радикала. ЕПР спектри спинских проба и спинских обележивача. Релаксациона времена, ширина ЕПР линија и спинска кинетика. Пулсна ЕПР спектроскопија са Фуријеовом трансформацијом. ЕПР технике двоструке резонанције. Примене ЕПР спектроскопије у физичкој хемији. <i>Практична настава</i> Одређивање структуре једињења на основу НМР спектра. Одређивање времена релаксације. Симулација НМР пулсних секвенција. Квалитативна и семиквантитативна анализа <i>in vivo</i> НМР спектра. Тумачење експерименталних ЕПР спектра. Утицај параметара снимања на ЕПР спектар. Утицај растварача и вискозности на ЕПР спектар. Квантитативна ЕПР анализа - израчунавање спинске густине.			
<b>Литература</b> 1. Malcolm H. Levitt, Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance, 2nd Edition, Wiley, 2008. 2. James Keeler, Understanding NMR spectroscopy, Wiley, 2004. 3. John A. Weil, James R. Bolton, Electron Paramagnetic Resonance - Elementary Theory and Practical Applications, John Wiley & Sons (2007). 4. Philip H Rieger, Electron Spin Resonance - Analysis and Interpretation, RCS Publishing (2007).			
<b>Број часова активне наставе</b>	<b>Теоријска настава: 2</b>	<b>Практична настава: 4</b>	
<b>Методе извођења наставе</b> Предавања и експерименталне вежбе.			
<b>Оцена знања (максимални број поена 100)</b>			
<b>Предиспитне обавезе</b>	поена	<b>Завршни испит</b>	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	
практична настава	30	усмени испит	40
колоквијум-и			
семинар-и	20		