

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: Мастер академске студије Физичка хемија			
Назив предмета: Спектри и структуре			
Наставници: Јеросимић Станка, Перић Миљенко			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 9			
Услов: Нема			
Циљ предмета Разматрање структуре спектра двоатомских, линеарних и нелинеарних вишеатомских молекула.			
Исход предмета Студенти стичу целовиту слику о томе како се експерименталне и теоријске методе комбинују и међусобно допуњују да би омогућиле тумачење спектра, у циљу добијања информација о структури молекула.			
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Борн-Опенхајмерова апроксимација. Површи потенцијалне енергије (равнотежна геометрија). Структура електронских стања и спектра двоатомских молекула. Корелација стања одвојених атома и сједињеног атома. Електронске конфигурације. Ротациони спектри, вибрациони спектри. Интеракција ротација и спин-орбитне спреге. Хундови случајеви спрезања. Добри квантни бројеви. Електронска структура и спектри вишеатомских линеарних молекула. Франк-Кондонов принцип, моменти прелаза. Вибронска интеракција. Ренер-Телеров ефекат. Структура и спектри нелинеарних молекула. Јан-Телеров ефекат. Дисоцијација. Дисоцијациони канали. Предисоцијација. <i>Практична настава</i> Рачунски задаци, домаћи задаци, анализа спектра, рад на рачунарима са програмским пакетима за рачунање структуре спектра, писање једноставнијих програма за рачунање и анализу специфичних спектра.			
Литература 1. М. Перић, Структура и спектри молекула, САНУ, Београд, 2009. ISBN 978-86-7025-489-3 2. А. Антић-Јовановић, Молекулска спектроскопија - спектрохемијски аспект, Факултет за физичку хемију, Београд, 2006. ISBN: 86-82139-16-2 3. G. Herzberg, The Spectra and Structure of Simple Free Radicals: An Introduction to Molecular Spectroscopy, Dover Publications, Mineola, 1971; ISBN: 978-0-486-65821-6. Г. Херцберг, Спектри и структуре простих слободних радикала – увод у молекулску спектроскопију, превели А. Антић-Јовановић и Д. Пешић, Грађевинска књига, Београд 1982. 4. J.M. Hollas, Modern Spectroscopy, 4 th Ed, John Wiley & Sons, Chichester, 2004. ISBN: 0 470 84416 7. 5. A. Ellis, M. Feher, T. Wright, Electronic and Photoelectron Spectroscopy: Fundamentals and Case Studies, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2005. ISBN: 978-0-521-81737-0.			
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 3		Практична настава: 4
Методe извођења наставе Предавања, дискусије, рачунске вежбе, рад с рачунарским програмима.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања (израда домаћих задатака)	20	семинарски рад – тему бира студент	30
семинарски рад – случај спектра одређеног молекула (<i>case study</i>)	20	писмени испит	30