



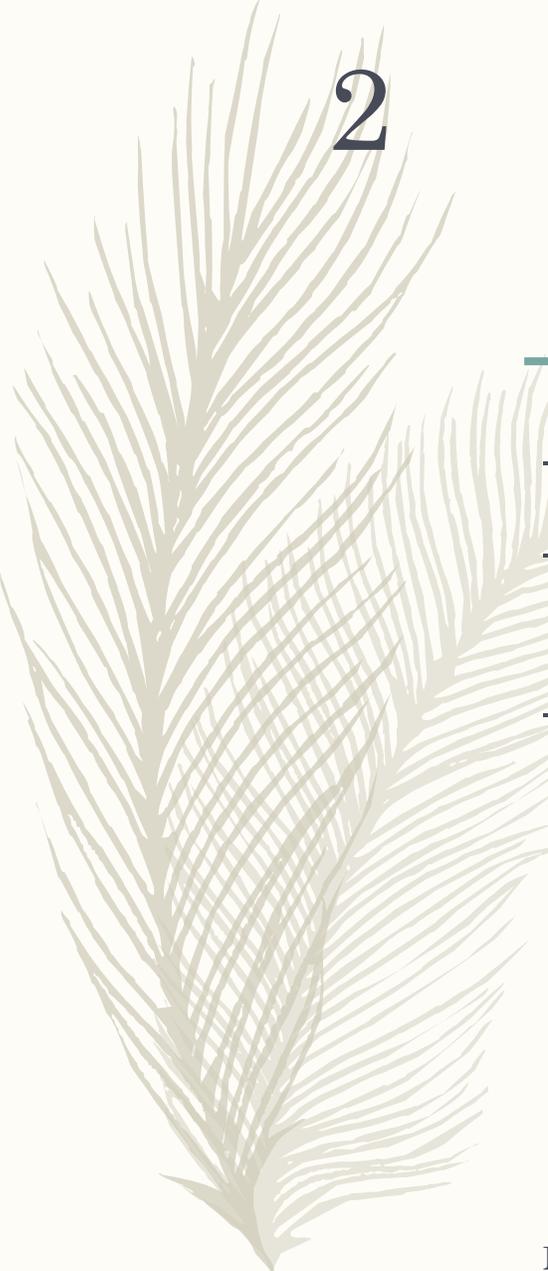
# Metode i metodologija fizičko-hemijskih istraživanja

---

## 2. predavanje

---

Ana Stanojević



# 2

# Sadržaj predavanja

---

- Opšti kvaliteti u metodologiji naučnog/fizičko-hemijskog istraživanja.
- Pregled disciplina fizičke hemije i metoda fizičko-hemijskih istraživanja.
- Proces fizičko-hemijskog istraživanja.

# 3

## Metode

- Instrumenti, procesi, tehnike, pomoću kojih istraživač dobija, sakuplja podatke. Konkretna sredstva kojima se vrši istraživanje.

## Metodologija

- Analiza/opis/studija koji standardi, modeli, obrasci, pravila, principi, uzori, faze, postulati, kao i kvalitativne i/ili kvantitativne tehnike (metode) se primenjuju, bi se mogli primeniti ili su bili primenjivani u odredjenom istraživanju, u odredjenoj naučnoj disciplini.

Metodologija je generalna istraživačka strategija koja pored ostalog, identifikuje i metode koje će se koristiti u istraživanju. To je analiza potrebna u dizajniranju istraživanja.

# 4

## Opšti kvaliteti u metodologiji naučnog/fizičkohemijskog istraživanja

---

- Dar posmatranja
- Sposobnost spajanja ideja, sposobnost da se iskoriste i ujedine prethodno akumulirane činjenice
- Sposobnost pravljenja korelacija između činjenica i izvođenja smislenih zaključaka
- Zdravorazumsko razmišljanje i kritičko mišljenje
- Entuzijazam, marljivost, posvećenost
- Kreativno mišljenje
- Kritička analiza pretpostavki, eksperimentalne ili teorijske postavke i rezultata
- Ponavljanje merenja i eksperimenata
- Reproductivnost
- Relacija mentor (učitelj) – učenik
- Timski rad
- Etički principi

# 5

Suština naučnog mišljenja/istraživanja je da razjasni da li je pretpostavljena „činjenica“ zaista činjenica i da analizira činjenice (rezultate merenja) kako bi se otkrili zakoni koji upravljaju promenama u činjenicama (merenim veličinama), nastalim kao posledice promena određenih uslova.

Značajno činjenično znanje je potrebno da bi se sprovodio bilo kakav eksperimentalan rad. Bez ovog znanja eksperimentisanje bi bilo besmisleno i čak opasno.

# 6

# Fizička hemija

---

- M. V. Lomonosov: Fizička hemija je nauka koja koristi zakone i eksperimente fizike da bi objasnila šta se dešava u smeši supstancija za vreme hemijske reakcije.
- Popunjava prazninu između fizike i hemije i povezuje ih. Interdisciplinarna nauka.
- Primenjuje fizičke koncepte i metode, i matematički aparat, na hemijske probleme i karakterizaciju sistema, na sebi svojstven način.
- Koristi principe i metode i hemije i fizike, proučava kako hemijska struktura utiče na fizička svojstva materije.



# 7

# Fizička hemija

---

Novi tip istraživačkog polja koje se pojavilo iz kombinacije fizike i hemije.

Ovo polje uključuje:

- fizičko-hemijska svojstva (npr. elektrohemijska, fotohemijska, termohemijska)
- hemijska svojstva sistema u kojima ne dolazi do hemijskih reakcija (npr. teorija rastvora, teorija ravnoteže faza),
- specifična svojstva materijala (npr. specifična električna provodljivost).



8

Koristeći teorije fizike i matematičke metode dolazi do razumevanja hemijskih svojstava materije (jedinjenja, materijala) i procesa na nivou atoma i molekula

Sprovodi simulacije, molekulska modelovanja, razvija matematičke jednačine, za analizu/objašjenje i predviđanje pojava i procesa

Proučava interakcije atoma i molekula sa zračenjem i dolazi do informacija o strukturi materije i svojstvima materije...

Proučava veze između električne energije i hemijske promene

Proučava veze između toplote i hemijskih reakcija

Na osnovu promene određenih fizičko-hemijskih svojstava prati/predviđa brzinu hemijskih reakcija

Fizikohemičar

# 9 Pregled disciplina fizičke hemije

- Hemijska kinetika: brzine hemijskih reakcija
- Kvantna hemija/Molekulska kvantna mehanika: kvantna mehanika primenjena na hemijske sisteme-proučavanje strukture i spektara molekula kvantnohemijskim metodama
- Biofizička hemija: fizička hemija bioloških sistema i fenomena
- Elektrohemija: interakcije atoma, molekula, jona i električne struje
- Hemijska termodinamika/Termohemija: proučava kako je toplota povezana sa hemijskom promenom
- Spektrohemija: proučava strukturu atoma i molekula pomoću spektara
- Fotohemija: hemijski efekti svetlosti, fotohemijske reakcije
- Hemija površina: hemijske reakcije na površinama
- Fizička hemija čvrstog stanja: struktura i fizičkohemijska svojstva kristalnih jedinjenja, fazni prelazi
- Fizička hemija makromolekula: struktura i fizičkohemijska svojstva makromolekula
- Statistička termodinamika: izračunavanje termodinamičkih veličina sistema na osnovu dinamičkog ponašanja njegovih mikroskopskih konstituenata
- Radiohemija i nuklearna hemija: hemija radioaktivnih materijala, primena radioaktivnosti u studiji hemijskih reakcija, nuklearne reakcije...
- Fizička hemija životne sredine: fizička hemija u studiji vode, vazduha, zemljišta, zagađujućih supstancija..
- Fizička organska hemija: veza strukture i reaktivnosti organskih molekula, primena fizičkohemijskih metoda u studiji organskih molekula

## Fizičko-hemijske metode

### Eksperimentalne

- Elektrohemija: potenciodinamičke (ciklovoltometrija), potenciostatske, galvanostatske, elektrohemijska impedansna spektroskopija (EIS), polarografija...
- Spektroskopija: FTIR, Raman, UV-Vis, EPR, NMR, XPS (fotoelektronska spektroskopija rendgenskih zraka), fluorescentna spektroskopija, AES (Auger-ova elektronska spektroskopija), EDS (energijski disperzivna spektroskopija), AAS, ...
- Fizička hemija čvrstog stanja, makromolekula, materijala: XRD, SAXS (Small-angle X-ray scattering), mikroskopije (SEM, TEM, STM, AFM...), masena spektrometrija, GPC (gelpropusna hromatografija), TGA, DTA, DSC, + spektroskopske, elektrohemijske...
- Hemija površina: DLS, merenje zeta potencijala (zetasiser), mikroskopske tehnike, FCS (fluorescentna korelaciona spektroskopija), SERS (surface enhanced Raman spectroscopy), CD (cirkularni dihroizam)... i mnoge druge.

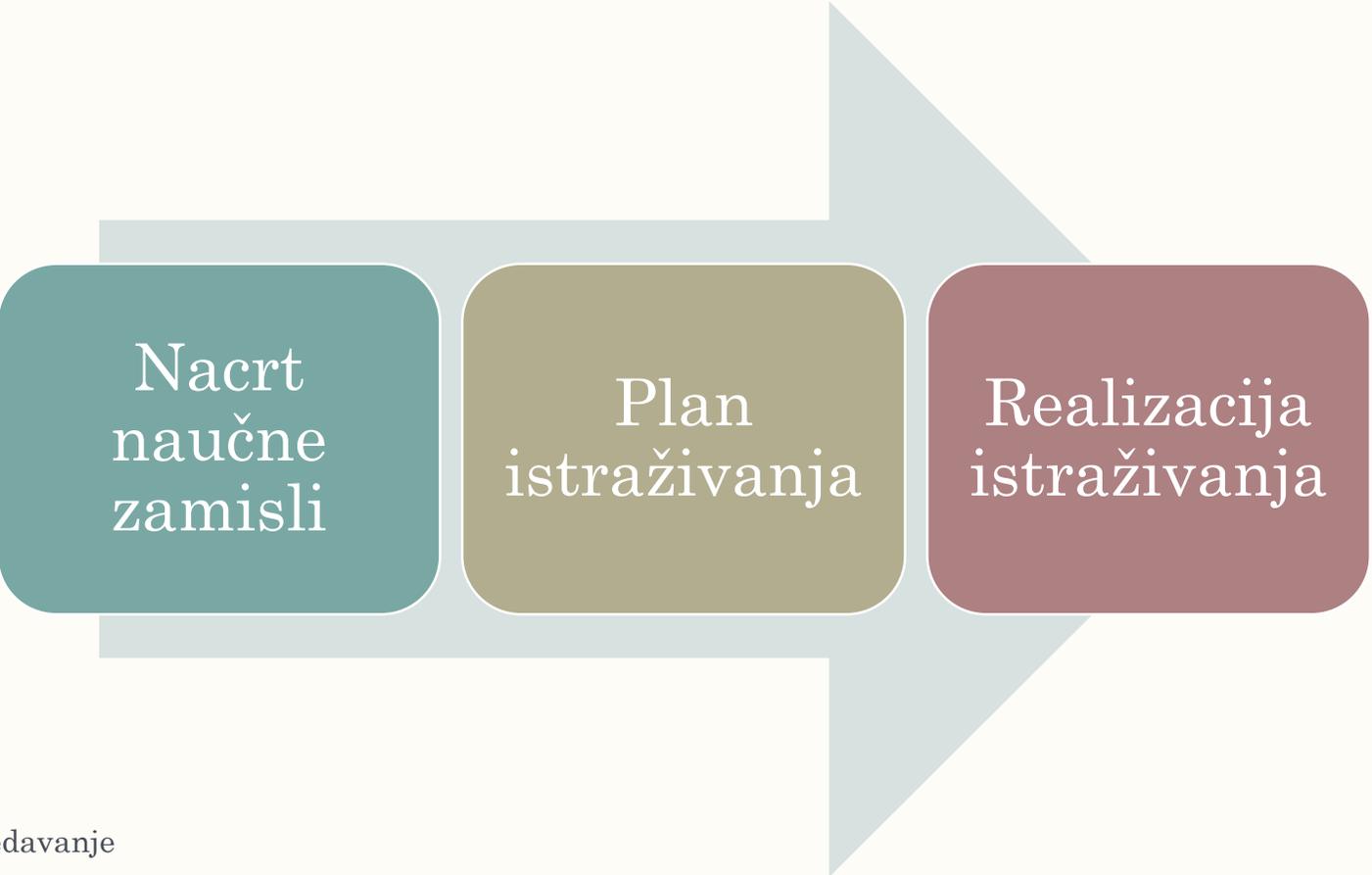
### Teorijske

- Ab initio
- semi-empirijske
- DFT kvantnohemijske metode
- Molekulska dinamika
- Monte Karlo metoda
- ...

11

# Proces istraživanja

---



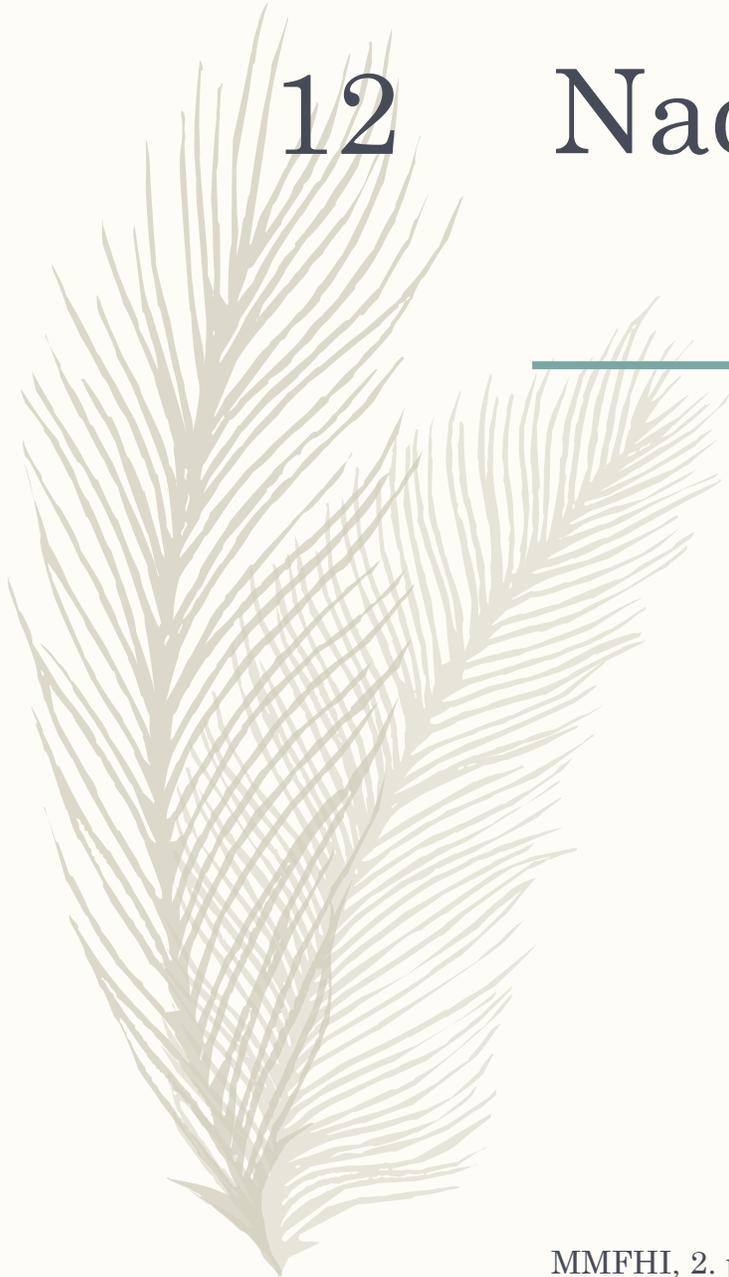
Nacrt  
naučne  
zamisli

Plan  
istraživanja

Realizacija  
istraživanja

# 12

# Nacrt naučne zamisli



# 13

# Problem istraživanja

---

Definicija značaja problematike koja se ispituje

Presek osnovnih teorija i rezultata, postojeća saznanja

Hipotetički stavovi o problemu koji se istražuje

## Teorijsko određenje predmeta

- Analiza teorijskih saznanja
  - \* Izdvajanje činjenica/saznanja

## Operacionalno određenje predmeta

- Činioci sadržaja predmeta
- Vremensko dimenzionisanje predmeta
- Prostorno određenje predmeta
- Disciplinarno određenje predmeta

# 15

# Cilj istraživanja

---

- Društveni cilj
- Naučni cilj

\* *Nivo naučnog saznanja:*

- ❖ *Naučno opisivanja*
- ❖ *Klasifikacija i tipologizacija*
- ❖ *Otkriće*
- ❖ *Objašnjenje*
- ❖ *Naučno predviđanje*

# 16

# Hipoteze

---



Generalna  
hipoteza

Posebne  
hipoteze

Pojedinačne  
hipoteze

# 17

## Hipoteze

### Pravila valjanosti hipoteze

---

- Proverljivost
- Odnosi se na predmet istraživanja
- Saznajno vredna
- Jasno formulisana
- Zasnovana na teoriji
- Praktično proverljiva (za empirijske hipoteze)

Nivo cilja istraživanja	Vrste hipoteza
Naučni opis	Relacione hipoteze
Klasifikacija i tipologizacija	Atributivne hipoteze
Naučno otkriće	Hipoteze sa heurističkim karakterom
Naučno objašnjenje	Kauzalne hipoteze
Naučne prognoze	

# 19

# Način istraživanja

---

- Izbor fizičkohemijskih metoda, planiranje i priprema eksperimenata ili teorijskog proračuna

# Naučna i društvena opravdanost istraživanja

---

## – Naučni doprinosi

- ❖ *Doprinosi konkretnoj nauci (opisivanje, sistematizovanje, otkrivanje, objašnjenje, povećane mogućnosti predviđanja)*
- ❖ *Doprinosi metodologiji (unapređenje tehničkih postupaka i instrumenata, unapređenje primenjene strategije, unapređenje logičko-saznajnog pristupa)*

## – Društveni doprinosi

- ❖ *Mogućnost da se rešava određeni društveni problem*

# 21

# Plan istraživanja

Plan kadrova	Plan potrebnog vremena	Plan sredstava
<ul style="list-style-type: none"><li>• Planovi rukovodioca projekta</li><li>• Planovi rukovodilaca podprojekata</li><li>• Planovi saradnika istraživača</li><li>• Planovi tehničkih saradnika</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Vremenske jedinice i rokovi za realizaciju istraživačkih operacija</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Plan finansija</li><li>• Plan prostora</li><li>• Plan tehničke opreme</li></ul>

# Realizacija istraživanja



# 23

## Predistraživanje

---

- Odabir saradnika
- Obuka saradnika
- Predistraživanje u užem smislu
  - ☐ Provera instrumenata
  - ☐ Provera pripremljenosti kadrova
  - ☐ Provera celokupne organizacije

# Prikupljanje podataka

---

- Postavka i izvođenje eksperimenta (ili simulacije, teorijskog proračuna)
- Sakupljanje podataka iz eksperimentalnih merenja ili proračuna
- Vođenje radnog dnevnika, pisanje izveštaja

25

# Obrada podataka

---

Pripremanje podataka

Razvrstavanje podataka

26

# Pripremanje podataka

---

Tehnička kontrola

Logička kontrola

# Razvrstavanje podataka

---

- Tehnička obrada podataka
- Razvrstavanje podataka po grupama, prema identičnim ili sličnim svojstvima
- Tehnička obeležavanja na osnovu kojih će podaci biti probrojani, a rezultati iskazani
  - Obeležavanje podataka
  - Prebrojavanje podataka
- Ukrštanje i tabeliranje podataka
  - Iskazivanje podataka

# Razvrstavanje podataka

## Ukrštanje i tabeliranje podataka

---

- Izbor podataka/grupa podataka koje treba ukrstiti
- Nivo i složenost ukrštanja
- Organizacija i oblik tabela
- Drugi specifični zahtevi

# 29

## Razvrstavanje podataka Iskazivanje podataka

---

- Numerički simboli (brojevi)
- Grafički simboli (crteži, grafikoni)
- Verbalni simboli (pisani tekst)
- Kombinovani simboli

# Analiza podataka

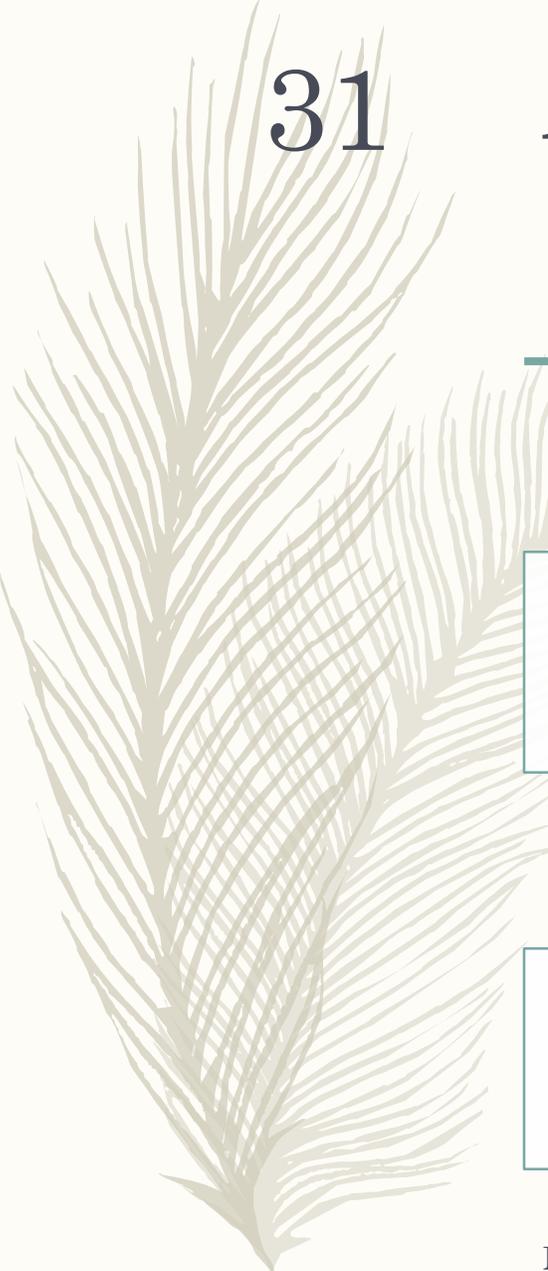
- Razlaganje dobijenih podataka na činioce i relacije
- Poređenje dobijenih podataka
- Konstatovanje činjenica u vidu određenih iskaza

1. Ocena podataka

2. Odabir postupka analize

3. Statistička analiza

4. Korelacija



31

# Analiza podataka

## Ocena podataka

---

Sistematske greške

Slučajne greške



32

# Analiza podataka

## Korelacija

---

Koreliranje rezultata, odnosno pronalaženje veza između rezultata, dobijenih pod različitim uslovima ili različitim metodama.

# Provera hipoteza

---

- Proveravaju se samo konkretne – pojedinačne hipoteze
- Jednom hipotezom se proverava samo jedan sadržajni nivo
- Između rezultata provere hipoteze ne sme da bude protivrečnosti
- Potvrđivanjem ili odbacivanjem jedne hipoteze se ne mogu potvrditi ili odbaciti hipoteze njoj suprotnog sadržaja

# Zaključak istraživanja

---

- Opravdava se (ili ne opravdava) naučni cilj istraživanja
- Deo istraživanja koji je na kondenzovan način vraćen naučnom fondu kao novi doprinos i uvećanje
- Istraživanjem konstatovane činjenice se sistematizuju, upoređuju i od njih se formiraju širi sistemi saznanja o stvarnosti
- Polazi se od elementarnih činjenica i njihovim sažimanjima dolazi do celovitog sagledavanja pojave koja je predmet istraživanja

35

# Diseminacija rezultata

---

Prezentacija rezultata

Pisanje naučnog rada

Priprema i prijava patenta

Primena rezultata

-> 11. predavanje