

Табела 5.1. Спецификација предмета на студијском програму докторских студија

<b>Назив предмета:</b> Спектроскопија вишеатомских молекула		
<b>Наставници:</b> Миљенко Перић, Радомир Ранковић		
<b>Статус предмета:</b> Изборни		
<b>Број ЕСПБ:</b> 10		
<b>Услов:</b> Нема услова		
<b>Циљ предмета</b> Стицање знања о структури и теоријском предвиђању спектра вишеатомских молекула, са нагласком на случајеве када долази до нарушавања Борн-Опенхајмерове апроксимације.		
<b>Исход предмета</b> Студент треба да разуме теорију вишеатомских молекула и начин теоријског израчунавања спектра ових молекула, које ће затим употребити за предвиђање и дешифровање експерименталних спектра.		
<b>Садржај предмета</b> <i>Теоријска настава</i> У оквиру предмета предаваћемо о квантно-механичкој ( <i>ab initio</i> ) методи за одређивање структуре молекула као и њихових спектра. Ова теорија захтева постављање и решавање Шредингерове једначине. Поред молекула чији се енергетски нивои (електронски, вибрациони и ротациони) могу одредити коришћењем хамилтонијана за случај Борн-Опенхајмерове апроксимације (када нема спреге између различитих модела кретања) разматраћемо и молекуле код којих постоје спреге (нпр. Ренер-Телеров ефекат код кога постоји спрега између електронског и вибрационог кретања или нпр. спин-орбитна спрега). Такви случајеви нису рутински и представљају научни проблем. У таквим случајевима одредићемо прво одговарајући хамилтонијан и поставити Шредингерову једначину а затим је (применом одговарајућег софтвера) решавати. Када одредимо енергије (нпр. виброне, када постоји електронско-вибрациона спрега) основног и побуђених стања као и таласне функције, израчунаваћемо и спектре. Реалне спектре вишеатомских молекула код којих постоје спреге, врло је тешко дешифровати и разумети без претходно урађеног теоријског прорачуна. У оквиру предмета даћемо и краћи осврт на експерименталне методе које се користе у детекцији молекулских спектра. <i>Практична настава</i> Коришћење софтверских пакета (Огса и Молпро) за рачунање спектра вишеатомских молекула. Упоредивање спектра молекула добијених теоријским поступком са онима које су експериментално добијени. Разматраћемо и ”проблем C <sub>2</sub> H молекула“ тј. комплексност његове структуре.		
<b>Препоручена литература</b> 1. Спектри и структуре молекула, М. Перић, САНУ, Београд, 2009. 2. Molecular Symmetry and Spectroscopy, P.R. Bunker, P. Jensen NRC Research Press, Ottawa 2012. 3. M. Perić, B. Engels, S.D. Peyerimhoff, Theoretical spectroscopy of small molecules: <i>Ab initio</i> investigations of vibronic structure, spin-orbit splittings and magnetic hyperfine effects in the electronic spectra of triatomic molecules In Understanding Chemical Reactivity (Series Ed. P.G. Mezey), Vol 13: Quantum Mechanical Electronic Structure Calculations with Chemical Accuracy, S.R. Langhoff (Ed.), Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands (1995). 4. Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins, R. Friedman Oxford University Press, 2005. 5. M. Mitić, R. Ranković, M. Milovanović, S. Jerosimić, M. Perić, Underlying theory of a model for the Renner-Teller effect in any-atomic linear molecules on example of the X <sup>2</sup> Π <sub>u</sub> electronic state of C <sub>5</sub> <sup>-</sup> , Chemical Physics, 464 (2016) 55.		
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 5	Практична настава: 2
<b>Методe извођења наставе</b> Предавања, дискусије, консултације, семинари, рад са рачунарима.		
<b>Оцена знања (максимални број поена 100):</b> Активност у току предавања: 10 поена; Семинари: 40 поена; Усмени испит: 50 поена		