

Програм колоквијума и литература за колоквијуме из Молекулске спектхрохемије, шк. 2022/2023

I колоквијум

ЕЛЕКТРОНАСКА АПСОРПЦИОНАСПЕКТРОСКОПИЈА

Интеракција електромагнетног зрачења и молекула супстанције. Врста молекулских кретања и односи енергија тих кретања. Области, подручја, енергије и облици јављања молекулских спектра. Моменти прелаза и правила избора. Потенцијална енергија двоатомских молекула, Морзеова функција. Ротациони, вибрациони и електронски спектри двоатомских молекула. Хромофоре, ауксохроме и антиауксохроме, дефиниција. Типови спектралних прелаза органских молекула ($\sigma\text{-}\sigma^*$, $\pi\text{-}\pi^*$, $n\text{-}\sigma^*$, $n\text{-}\pi^*$ прелази). Утицај природе супституената на спектрално понашање једноставнијих хромофорних система са $\pi\text{-}\pi^*$ и $n\text{-}\pi^*$ прелазима. Солвентохромија и солватохромија у молекулским спектрима једноставнијих хромофорних система са $\pi\text{-}\pi^*$ и $n\text{-}\pi^*$ прелазима. Изосбестна тачка, значај. Електронтрансферски (Е-Т) прелази. Примена SEMO теорије на линеарне делокализоване π -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 анализа 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) И ЕЛЕКТРОНСКА ЕМИСИОНА СПЕКТРОСКОПИЈА

НМР спектроскопија, 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 спектроскопија, 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.

Електронски емисиони спектри, спектри флуоресценције и фосфоресценције, настајање, карактеристични параметри, фактори утицаја на карактеристике емисионих спектра. Експерименталне технике добијање електронских емисионих спектра.

Полагање колоквијума:

Рачунски задатак (елиминаторан) и усмено полагање теоријских основа.

I Колоквијум

Молекулска спектроскопија, спектрохемијски аспект, А. Антић-Јовановић

Поглавље 1: Увод (цело поглавље)

Поглавље 2: Интеракција електромагнетног зрачења и молекула супстанције.

Спектрални прелази

- поглавље 2.4.

Поглавље 4: Ротациони спектри

- поглавља: 4.1; 4.2; 4.7.

Поглавље 5: Вибрациони спектри

- поглавља: 5.1; 5.4.1.

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 спектрохемије, 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, спектрохемијски 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 спектрохемије, Ј. Димитрић Марковић

Поглавље 6: Вибрациони спектри молекула

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

III Колоквијум

Молекулска спектроскопија, спектрохемијски 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 спектроскопије, 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.

Практични аспекти одабраних поглавља молекулске спектроскопије, Ј. Димитрић Марковић

Поглавље 4: Електронски емисиони спектри, спектри луминисценције

- поглавља: 4.1; 4.2; 4.3; 4.3.1; 4.3.2.; 4.4; 4.4.1; 4.4.1.1; 4.4.1.2; 4.5; 4.5.1; 4.5.2; 4.5.3.

Напомена 1: 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.