



1. PREDMET: INFRARDEČA IN RAMANSKA SPEKTROSKOPIJA

Šifra: 30-2036

Število kreditnih točk (ECTS): 9

Obseg ur: 45; predavanja 45,

Program: podiplomski študij – smer Kemija

2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

Namen predavanj je spoznavanje pristopov infrardeče in ramanske spektroskopije za reševanje strukturnih problemov materialov (monokristali, polimeri, tanki filmi) ter uporaba eksperimentalnih in teoretičnih metod vibracijske spektroskopije za študij izbranih materialnih lastnosti, kot so interkalacija/deinterkalacija ionov pri redoks procesih v tankih filmih, mehanizmi prevajanja v ionskih prevodnikih, fotokromne lastnosti.

3. VSEBINA

- A) **Kvantno mehanske osnove vibracijske spektroskopije:** Schrödingerjeva enačba, prehodni moment za absorbcijo, harmonski oscilator, elektromagnetno nihanje ter Einsteinovi koeficienti za absorbcijo in emisijo
- B) **Nihanje večatomskih molekul:** kinetična energija, potencialna energija, notranje koordinate, kvantna slika, računanje normalnih nihanj, GF metoda in polje sil (GVFF, Urey-Bradly, ab-initio).
- C) **Nihanje monokristalov:** nihanje neskončne dvoatomske verige, nihanje kovalentnih in molekulskih kristalov, interakcija nihanj s sevanjem, oscilatorski model, določanje optičnih konstant iz vibracijskih spektrov (zglede)
- D) **Simetrija in vibracijski spektri:** točkovne grupe, faktorske grupe in zglede
- E) **Instrumenti za določanje vibracijskih spektrov:** Disperzni spektrometri, FT-IR spektrometri, merilne tehnike (transmisijska, refleksijska, emisijska in ATR merilna tehnika). Ramanski spektrometri in tehnike (disperzni, FT-ramanski spektrometri).
- F) **Vibracijski spektri:** tri-, štiri-, petatomske molekule, ciklične molekule (benzen).
- G) **Vibracijska spektroskopija biološko pomembnih molekul:** vibracijska spektroskopija peptidov, peptidne vezi, DNA, nihanja fosfodiestrov, konformacijske študije nukleotidov, lipidi.
- H) **Vibracijska spektroskopija anorganskih spojin:** -
eksperimentalni pristopi: refleksijska, transmisijska, emisijska spektroskopija, študij nihanj

monokristalov, prahov in tankih filmov

- in-situ spektroelektrokemične meritve interkalacijskih spojin (filmi, prahovi).

- I) **Ramanska spektroskopija:** klasična slika in ramanski efekti, polarizabilnostni-ten zor, izbirna pravila, Ramanski efekt na monokristalih, resonančni-ramanski efekt, nelinearni ramanski efekt (Kerrov efekt, hiperRaman, stimulirani Raman, CARS), SERS in njegova uporaba v elektrokemiji.

4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

Predmet predpostavlja dobro poznavanje izbranih poglavij iz fizike (mehanika, elektromagnetno valovanje) in predmeta Struktura atomov in molekul.

5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

- Max Diem: *Introduction to Modern Vibrational Spectroscopy*, John Wiley, New York, 1993.
- A. Fadini and F.M. Schnepel: *Vibrational Spectroscopy*, Ellis Harwood, Series in Analytical Chemistry (Ed. J.T. Kemp), John Wiley, New York, 1989.
- G. Turell: *Infrared and Raman Spectra of Crystals*, Academic Press, London, 1972.
- G. Herzberg: *Molecular Spectra and Molecular Structure (I and II)*, R. van Nostrand Co., London, 1950.
- B.D. Straughan, S. Walker: *Spectroscopy (II)*, Chapman and Hall, London, 1976.

6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

Seminarska naloga in izpit

PRIPRAVIL: dr. Boris Orel, univ. znanstv. svetnik

DATUM: 04. 02. 2004