



1. PREDMET: SPEKTROSKOPSE METODE V ORGANSKI KEMIJI

Šifra: 30-2011

Število kreditnih točk (ECTS): 12

Obseg ur: 60; predavanja 30, vaje 30

Program: podiplomski študij - smer Kemija

2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

Pri tem predmetu si bodo študenti razširili znanje in se izurili v uporabi modernih spektroskopskih metod s poudarkom na uporabi le-teh v organski kemiji.

3. VSEBINA

PONOVITEV FIZIKALNIH OSNOV SPEKTROSKOPIJE (elektromagnetno valovanje in interakcija z materijo; energetska stanja, prehodi med njimi; absorpcija in emisija energije).

UV/VIS SPEKTROSKOPIJA (absorpcijski spektri; fluorescenca, fosforescenca)

POLARIMetriJA IN SORODNE TEHNIKE (merjenje specifičnega kota zasuka; optična rotacijska disperzija; cirkularni dihiroizem).

VIBRACIJSKA IN ROTACIJSKA SPEKTROSKOPIJA (Ramanska, IR in mikrovalovna spektroskopija).

NUKLEARNA MAGNETNA REZONANCA (NMR) (osnove NMR eksperimenta z vektorskim opisom; FID, Fourierjeva transformacija; frekvenčni spekter, posledice matematične manipulacije FID; relaksacije; spin-echo pulzna sekvenca in njene posledice; prenos polarizacije in editiranje spektrov; nuklearni Overhauserjev efekt; uvod v dvo- in večdimenzionalne NMR eksperimente; pregled principov in uporabe dvodimenzionalnih NMR metod pri določanju kemijske strukture in konformacije molekul v raztopini).

EPR SPEKTROSKOPIJA (osnove EPR eksperimenta; EPR spektri; hiperfina struktura).

RENTGENSKA DIFRAKCIJA (osnove, določanje 3D strukture spojin v kristalu).

Vaje iz NMR spektroskopije

Priprava vzorca in inštrumenta; 1D eksperimenti (^1H , ^{13}C , X); 2D eksperimenti (COSY, TOCSY, HMQC, HMBC, gs-COSY, gs-HMQC, gs-HMBC).

4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

Vsebina predmeta se navezuje na vsebine predmetov na dodiplomskem študiju kemije: organska kemija, organska analiza.

5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

OSNOVNI UČBENIK:

- M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, *Spectroscopic Methods in Organic Chemistry*, G. Thieme Verlag, 1997.
- S. Golič-Grdadolnik, J. Košmrlj, A. Petrič, *Osnovni eksperimenti za določanje kemijske strukture in konformacije molekul v tekočini z metodami NMR spektroskopije*, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 1996.

DODATNA LITERATURA:

- S. Braun, H.-O. Kalinowski, S. Berger, *150 and More Basic NMR Experiments*, Wiley-VCH Publishers, Weinheim, 1998.
- A. E. Derome, *Modern NMR Techniques for Chemistry Research*, Pergamon Press, Oxford, 1987.

6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

Študent mora opraviti vaje in ustni izpit.

7. POSEBNOSTI

Pri vajah pridejo študenti v stik z močnim magnetnim poljem, ki lahko škoduje osebam z vsajenim srčnim vzpodbujevalcem in umetnimi sklepi.

PRIPRAVIL: Andrej Petrič

DATUM: 20. 08. 2003