

UČNI NAČRT PREDMETA / COURSE SYLLABUS

Predmet:	SPEKTROSKOPIJA
Course Title:	SPECTROSCOPY

Študijski program in stopnja Study Programme and Level	Študijska smer Study Field	Letnik Academic Year	Semester Semester
UŠP Kemija, 1. stopnja	/	2.	4.
USP Chemistry, 1 st Cycle	/	2 nd	4 th

Vrsta predmeta / Course Type: obvezni / Mandatory

Univerzitetna koda predmeta / University Course Code: KE134

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Vaje Tutorial	Klinične vaje Work	Druge oblike študija	Samost. delo Individual Work	ECTS
30	30	15 LV	/	/	75	5

Nosilec predmeta / Lecturer: prof. dr. Janez Košmrlj / Dr. Janez Košmrlj, Full Professor
izr. prof. dr. Barbara Modec / Dr. Barbara Modec, Associate Professor

Jeziki / Languages:

Predavanja / Lectures:	slovenski / Slovenian
Vaje / Tutorial:	slovenski / Slovenian

Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:

Študent oz. kandidat mora imeti predmet opredeljen kot študijsko obveznost.	Prerequisites: The course has to be assigned to the student.
---	--

<p>Vsebina:</p> <p>Uvod v vibracijsko spektroskopijo Izvor spektrov, simetrijski elementi, točkovne skupine, simetrija normalnih nihanj in izbirna pravila, osnove teorije grup.</p> <p>Uporaba vibracijske spektroskopije v anorganski kemiji Dvoatomarne in troatomarne molekule, piramidalne in planarne štiriatomarne molekule, tetraedrične in kvadratno-planarne petatomarne molekule, oktaedrične molekule; spektri akva, hidrokso in okso kompleksov, spektri kompleksov z anionskimi ligandi kot so sulfat, karbonat, nitrat, oksalat, cianid in halogenid, spektri kompleksov z nevtralnimi</p>	<p>Content (Syllabus outline):</p> <p>A) introduction to vibrational spectroscopy: spectra, symmetry elements, selection rules. B) application of vibrational spectroscopy in inorganic chemistry: two- and three-atom molecules, pyramidal and planar four-atom molecules, tetrahedral and square-planar molecules, octahedral molecules, complexes with ligands such as water, hydroxide, oxide, sulphate, carbonate, nitrate, nitrosyl, etc. C) application of vibrational spectroscopy in organic chemistry: important IR chromophores (OH, NH, CH, C≡N, C≡C, C=O, C=N, C=C, C-O, C-N, C-X, NO₂), D) introduction to electronic spectroscopy: basic principles, spectra of</p>
--	--

ligandi kot so amin, karbonil ali nitrozil.

Uporaba vibracijske spektroskopije v organski kemiji

Pomembni IR kromoforji v organskih spojinah (OH, NH, CH, C≡N, C≡C, C=O, C=N, C=C, C–O, C–N, C–X, NO₂), vpliv konjugiranosti na IR absorpcije.

Uvod v elektronsko spektroskopijo

Izvor elektronskih spektrov, spektri organskih molekul ($\pi-\pi^*$ in $n-\pi^*$ prehodi). Spektri kompleksov kovin prehoda (d-d trakovi, trakovi s prenosom naboja iz kovine na ligand in iz liganda na kovino).

Uporaba elektronske spektroskopije v anorganski kemiji

Spektri oktaedričnih kompleksov, spektri tetraedričnih kompleksov.

Uporaba elektronske spektroskopije v organski kemiji

Kvantitativni aspekti UV spektroskopije, razvrstitev UV absorpcijskih trakov, pomembni UV kromoforji v organskih spojinah, efekt topila, empirična pravila za izračun absorpcijskih trakov.

Uvod v jedrsko magnetno resonanco

Narava jedrskih spinov in NMR instrumentacija, »continuous wave« NMR spektroskopija, »Fourier-transform« NMR spektroskopija, kemijski premiki v ¹H NMR spektroskopiji, spin-spin sklopitve v NMR spektroskopiji

Uporaba NMR v organski kemiji in anorganski kemiji

Analiza ¹H NMR spektrov, ¹³C NMR spektroskopija, sklopitve in nesklopitve v ¹³C NMR spektrih, določitev multiplikacije ¹³C NMR spektrov z uporabo DEPT metode, senčenje in značilni kemijski premiki v ¹³C NMR spektrih, dinamični procesi v NMR spektroskopiji, korelacijska spektroskopija, NMR spektroskopija drugih jeder, vpliv topila, določanje strukture organskih spojin na osnovi NMR spektrov.

Masna spektrometrija

Ionizacijski procesi, instrumenti, fragmentacijski procesi, primeri najpogostejših fragmentacijskih procesov pri osnovnih tipih

organic compounds, spectra of transition metal complexes. E) application of electronic spectroscopy in inorganic chemistry: spectra of octahedral, tetrahedral, and other complexes. F) application of electronic spectra in organic chemistry: quantitative aspects of UV spectroscopy, important UV chromophores, UV absorption bands, solvent effect, empirical rules. G) introduction to nuclear magnetic resonance: chemical shift, coupling, integral, NMR active nuclei, continuous wave vs. pulse NMR. H) application of NMR in organic and inorganic chemistry: analysis of proton and carbon NMR spectra, coupled and decoupled carbon spectra, DEPT, basics of dynamic NMR, an informative overview of correlation spectroscopy, some other relevant nuclei. I) mass spectrometry: ionization processes, instruments, fragmentations, examples of the most important fragmentations in important types of organic compounds (carbohydrates, hydroxyl compounds, ethers, ketones, aldehydes, carbocyclic compounds).

organskih molekul.

Temeljna literatura in viri / Readings:

- Alan Vincent: Molecular symmetry and group theory. A programmed introduction to chemical applications. John Wiley & Sons, 1996, 156 str. (strani 22-65, 85-102 in 121-138, skupaj 77 strani)
- N. B. Colthup, L. H. Daly and S. E. Wiberley: Introduction to infrared and Raman spectroscopy. Academic Press, 1964, 511 str. (strani 1-37, 168-191, skupaj 60 strani)
- R.M.Silverstein, F.X.Webster. Spectroscopic Identification of Organic Compounds, John Wiley&Sons, 502 str., (izbrana poglavja skupaj 100 strani)

Dodatna literatura:

- K. Nakamoto: Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds. Part B: Applications in coordination, organometallic and bioinorganic chemistry, 5th ed., John D.L.Pavia, G.M.Lampman, G.S.Kriz. Introduction to Spectroscopy, Harcourt College Pub. 2001.

Cilji in kompetence:

Cilji: Seznaniti študenta z najpomembnejšimi spektroskopskimi metodami, ki se uporabljajo v anorganski in organski kemiji, pri čemer je poudarek na osnovah, ki so potrebne za interpretacijo spektrov pri praktičnem delu. Prikazati značilne primere uporabe vibracijske in elektronske spektroskopije, jedrske magnetne resonance in masne spektrometrije pri reševanju problemov v anorganski in organski kemiji, predvsem pa pri določevanju struktur in sestave vzorcev.

Specifične kompetence:

Študent pozna in razume osnovne principe spektroskopskih metod, praktičnega snemanja spektrov in uporabe tega znanja pri karakterizaciji spojin. Eksperimentalne rezultate zna kritično ovrednotiti.

Objectives and Competences:

Ability to understand basic principles of spectroscopic methods, techniques for acquiring spectra in characterization of compounds as well as to critically assess the results. Understanding the principles of the most important spectroscopic methods used in inorganic and organic chemistry. Knowledge of basics required for spectral interpretation. Vibrational and electronic spectroscopy, nuclear magnetic resonance, and mass spectrometry in structure elucidation of inorganic and organic compounds.

Predvideni študijski rezultati:

Znanje in razumevanje

Študent spozna osnove spektroskopskih metod in se nauči njihove uporabe pri karakterizaciji spojin.

Uporaba

Pridobljena znanja so nepogrešljiva za karakterizacijo spojin in kot takšna osnova za praktično uporabo in nadaljnje raziskovalno delo.

Intended Learning Outcomes:

Knowledge and Comprehension

Student learns basics of spectroscopic methods and their application at the characterization of compounds.

Application

The learned knowledge is indispensable at the characterization of the compounds and further research work.

<p><u>Refleksija</u> Pridobljena znanja so nepogrešljiva za karakterizacijo spojin in kot takšna osnova za praktično uporabo in nadaljnje raziskovalno delo.</p>	<p><u>Analysis</u> The learned knowledge is indispensable at the characterization of the compounds and further research work.</p>
<p><u>Prenosljive spretnosti</u> Študent pri predmetu pridobi specifična praktična znanja o spektroskopskih tehnikah, ki jih lahko uporablja na različnih področjih npr. v analizi živil, farmacevtskih učinkovin, forenzični analizi itn. Nauči se tudi uporabe elektronskih baz, ki vsebujejo IR, NMR in masne spektre.</p>	<p><u>Skill-transference Ability</u> The gained knowledge finds application in different research areas such as food and drugs analysis, forensic studies, etc. The student also gets familiar with the databases, containing IR, NMR and MS spectra.</p>

Metode poučevanja in učenja:

Predavanja, seminarji, laboratorijske vaje: vključujejo delo na FTIR inštrumentu, UV-vidnem, masnem in NMR spektrometru.

Learning and Teaching Methods:

Lectures, seminars, practicals. Practical include acquiring hands on experiences with spectrometers.

Načini ocenjevanja:

Pisni izpit. Ocenjevalna lestvica v skladu z enotno lestvico ECTS na Univerzi v Ljubljani: 6 – 10 opravil izpit 1 – 5 ni opravil izpita	Delež (v %) / Weight (in %)	Assessment:

Reference nosilca / Lecturer's references:

- A. Demšar, J. Košmrlj, S. Petriček: Variable-temperature nuclear magnetic resonance spectroscopy allows direct observation of carboxylate shift in zinc carboxylate complexes. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 3951–3958.

- J. Košmrlj, S. Kafka, I. Leban, M. Grad: Formation and Structure Elucidation of Two Novel Spiro[2*H*-indol]-3(1*H*)-ones, *Magn. Reson. Chem.* **2007**, *45*, 700–704.

- D. Urankar, A. Pevec, I. Turel, J. Košmrlj: Pyridyl Conjugated 1,2,3-Triazole is a Versatile Coordination Ability Ligand Enabling Supramolecular Associations. *Cryst. Growth Des.* **2010**, *10*, 4920–4927.

- F. A. Cotton, E. V. Dikarev, J. Gu, S. Herrerro, B. Modéc: Alkylpyridine complexes of tungsten(II) and chromium(II). First rotational isomers of $W_2X_4L_4$ molecules with D_{2h} and D_2 symmetries. *Inorg. Chem.* **2000**, *39*, 5407–5411.

- B. Modéc, D. Dolenc, J. V. Brenčič, J. Koller, J. Zubieta: Dinuclear oxomolybdate(V) species with oxalato and pyridine ligands revisited: *cis/trans* isomerization of $[Mo_2O_4(\eta^2-C_2O_4)_2(R-Py)_2]^{2-}$ (R-Py = pyridine, alkyl-substituted pyridine) in water evidenced by NMR spectroscopy. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 3224–3237.

- B. Modéc, D. Dolenc, J. V. Brenčič: New molybdenum(V) complexes based on the $\{Mo_2O_4\}^{2+}$ structural core with esters or anions of malonic and succinic acid. *Inorg. Chim. Acta* **2007**, *360*, 663–678.



UL FKKKT