

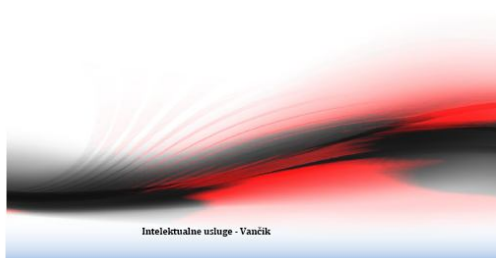
## Predstavljamo...

### STRUKTURNA ANALIZA SPOJEVA SPEKTROSKOPSKIM METODAMA

PREDRAG NOVAK

TOMISLAV JEDNAČAK

*Manualia Universitatis studiorum Zagabiensis  
Udžbenici Sveučilišta u Zagrebu*



### STRUKTURNA ANALIZA SPOJEVA SPEKTROSKOPSKIM METODAMA

Udžbenik Sveučilišta u Zagrebu

#### **Autori:**

Predrag Novak

Tomislav Jednačak

#### **Nakladnik:**

TIVA, Varaždin

ISBN: 9789533330266

Godina: 2014

Stranica: 255

## Sadržaj

1. UVOD
2. SPEKTROSKOPIJA NMR
  - 2.1. Interakcije spinova
  - 2.2. Pulsevi
  - 2.3. NMR spektrometar
  - 2.4. Osnovni parametri u spektroskopiji NMR
  - 2.5. Kemijska i magnetna ekvivalencija; spinski sustavi
  - 2.6. Spinska jeka
  - 2.7. Koherencija
  - 2.8. Nuklearni Overhauserov efekt
  - 2.9. Jednodimenzijske tehnike NMR
  - 2.10. Dvodimenzijske tehnike NMR
  - 2.11. Tehnike NMR koje se temelje na dipolnom sprezanju
  - 2.12. Tehnike NMR u čvrstom stanju
3. VIBRACIJSKA SPEKTROSKOPIJA

- 3.1. Vibracije višeatomnih molekula
- 3.2. Infracrvena spektroskopija
- 3.3. Infracrveni spektrometar
- 3.4. Ramanova spektroskopija
- 3.5. Ramanov spektrometar
- 3.6. Skupinske vibracije
- 3.7. Pravilo isključenja
4. ELEKTRONSKA SPEKTROSKOPIJA
- 4.1. Auksokromi
- 4.2. Konjugirani kromofori
- 4.3. Utjecaj otapala
- 4.4. Primjena elektronske spektroskopije
5. SPEKTROMetriJA MASA
- 5.1. Tehnike ionizacije
- 5.2. Analizatori mase
- 5.3. Spektar masa
6. INSTRUMENTI I UVJETI SNIMANJA
- 6.1. NMR spektri
- 6.2. Vibracijski spektri
- 6.3. Spektri u UV i vidljivom području
- 6.4. Spektri masa
7. PRIMJERI RJEŠAVANJA STRUKTURE NEPOZNATIH SPOJEVA
8. ZADACI ZA VJEŽBU
9. RJEŠENJA
10. LITERATURA
11. POPIS KRATICA

Ovaj udžbenik nastao je na temelju predavanja iz kolegija "Identifikacija kemijskih spojeva spektroskopskim metodama" i "Spektroskopska strukturna analiza" koji su se održavali za studente kemije na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu. Jedan od razloga za pisanje ovoga udžbenika jest i činjenica da na hrvatskom jeziku ne postoji slična literatura pa će studenti po prvi put na vlastitom jeziku imati prilike čitati o različitim metodama i njihovoj primjeni u strukturnoj analizi.

To se naročito odnosi na spektroskopiju nuklearne magnetne rezonancije i spektrometriju masa koje su u posljednja dva desetljeća postale nezamjenjive metode za organsku strukturnu analizu. U njemu su skupljena iskustva stečena tijekom predavanja, praktičnog rada i diskusije sa studentima, što je u velikoj mjeri pripomoglo u odabiru primjera koje će studenti najbolje razumjeti.

Identifikacija i određivanje strukturnih parametara molekula pomoću spektroskopskih metoda i tehnika nezaobilazno je područje suvremene kemijske znanosti s kojim se studenti kemije i srodnih područja trebaju upoznati tijekom studija. Cilj je ovog udžbenika podučiti studente kako pristupiti rješavanju jednostavnih i složenih strukturnih problema kombinacijom različitih spektroskopskih metoda, primarno spektroskopijom nuklearne magnetne rezonancije (NMR), infracrvenom spektroskopijom (IR), Ramanovom spektroskopijom i spektroskopijom u ultraljubičastom i vidljivom dijelu spektra (UV-Vis) te spektrometrijom masa (MS). Udžbenik je prije svega namijenjen studentima kemije i srodnih studija (biokemije, kemijskog inženjerstva i tehnologije, farmacije i sl.) koji slušaju kolegije vezane uz strukturnu analizu kemijskih spojeva, ali i ostalim studentima viših godina studija te studentima doktorskih studija koji su odslušali osnovne kolegije iz kemije i pokazuju interes za analizu. U svom najvećem dijelu udžbenik se bavi organskim molekula, no tehnike koje su opisane mogu se uspješno primijeniti i za analizu biomolekula kao što su peptidi, proteini, nukleinske kiseline te polisaharida i kompleksnih spojeva metala koji kao ligande imaju organske strukturne jedinice. Udžbenik je podijeljen u tri osnovne cjeline. U prvom dijelu dan je kratak opis i karakteristike spektra elektromagnetnog zračenja i interakcija s materijom. Nadalje, opisane su glavne teorijske pretpostavke na kojima počivaju pojedine spektroskopske tehnike s ciljem da studenti steknu ili ponove osnovna znanja iz kolegija fizikalne i analitičke kemije kako bi lakše razumjeli zašto se upravo pojedina tehnika koristi za dobivanje specifičnih informacija o strukturi. Ovaj udžbenik ne ulazi u teorijsku interpretaciju na višoj matematičkoj razini i nije dovoljan za sva teorijska znanja koja studenti trebaju imati za razumijevanje pojedinog dijela gradiva. Objašnjen je inter-aktivan pristup rješavanju strukture molekula pažljivom interpretacijom spektara i kombinacijom dobivenih podataka koji uključuju informacije o molekulskoj formuli, funkcijskim skupinama, konfiguraciji, konformaciji, radnim strukturama te na kraju rezultiraju određivanjem prave ili točne strukture nepoznate molekule.

U drugom dijelu dani su primjeri kako se rješava struktura nepoznatih molekula. Prikazani su i analizirani njihovi spektri te su pokazani i opisani glavni stupnjevi u identifikaciji i određivanju strukture molekula. Prvo su pojašnjeni primjeri rješavanja strukture jednostavnih molekula, a zatim i složenijih sustava uključujući one u kojima postoji visoka simetrija te one gdje postoji ravnoteža između pojedinih strukturnih formi. Objašnjene su tehnike koje se koriste u takvim slučajevima i načini određivanja udjela pojedinih izomera. Opisane spektroskopske tehnike najčešće se koriste za identifikaciju i određivanje 2D strukture molekula. Nadalje, na primjeru su pojašnjene i neke specifične tehnike koje mogu dati uvid i u 3D strukturu i konformaciju molekula u otopini. Konačno, cilj je ovog udžbenika pokazati kako se na najjednostavniji način može doći od eksperimentalnih podataka (spektara) do strukture. Treći dio obuhvaća odabrane primjere zadataka sa spektrima nepoznatih molekula koje studenti trebaju riješiti sami ili u skupinama od po tri studenta.

Priredio Predrag Novak

**47. međunarodni simpozij**  
**GORIVA 2014**  
**16.-17.10. 2014. ■ Solaris Resort**  
**Šibenik ■ Hrvatska**

---

**PRVA OBAVIJEST – POZIV ZA REFERATE**

---

Hrvatsko društvo za goriva i maziva organizira **47. stručno-znanstveni međunarodni simpozij GORIVA 2014.** u Šibeniku od 16.-17. listopada 2014. te objavljuje Prvu obavijest-poziv za prijavu referata.

Ovogodišnji simpozij fokusira se na područje goriva i sve aspekte vezane za njihovu proizvodnju, distribuciju i primjenu. Promjene na globalnoj karti rafinerijske prerade koje se odražavaju na potražnju, te strogi europski zahtjevi za smanjenjem emisija ugljikovodika, mogu se sažeti u jednom pitanju: kako biti konkurentan i opstati?

Odgovore na ovo i ostala pitanja nastojat će dati GORIVA 2014 u sklopu sljedećih tema:

- **Tehnologije prerade i trendovi razvoja u proizvodnji goriva i biogoriva, tehnološka rješenja i dostignuća u rafinerijskoj preradi, kvaliteta goriva, upravljanje procesima, energetska učinkovitost.**
- **Istraživanja vezana uz razvoj metoda i postupaka ispitivanja i primjene goriva i biogoriva sukladno zahtjevima kvalitete.**
- **Zaštita okoliša i zakonodavni okviri reguliranja odnosa u naftnom gospodarstvu.**

**Rasprava Okruglog stola** bit će usmjerena na utjecaj ekoloških direktiva na preradu nafte i primjenu goriva i biogoriva s naglaskom na dosadašnje rezultate i očekivanja u budućnosti.

---

**UPUTE AUTORIMA**

---

**Jezik Simpozija** - Radovi će biti prezentirani na engleskom jeziku.

**Sažetak** - Sažetak može sadržavati do pola tipkane stranice (bez tablica i slika). Sažeci na engleskom i hrvatskom jeziku bit će objavljeni u Zborniku sažetaka.

Organizacijski odbor će pregledati sve pristigle sažetke i odabrati radove koji će biti predstavljeni na simpoziju.

**Prezentacija radova** - Prezentacija radova / predavanja ograničena je na 15 minuta, uz korištenje uobičajenih audio-vizualnih pomagala.

Predviđena je i **poster sekcija**.

**Objavljivanje radova** - Radovi priređeni u formi za tisak bit će recenzirani i objavljeni u časopisu *Goriva i maziva*.

**Rokovi** - Sažetke molimo poslati do 23.5.2014.

**PRIJAVNICU za RAD** možete naći na [www.goma.hr](http://www.goma.hr)

**KOTIZACIJA**

**1800 KN** - za sudionike

**600 KN** - za prvog autora/predavača

**47<sup>th</sup> International Symposium**  
**FUELS 2014**  
**October 16-17, 2013 ■ Solaris Resort**  
**Šibenik ■ Croatia**

---

**FIRST NOTICE - CALL FOR PAPERS**

---

Croatian Society for Fuels and Lubricants organizes the **47<sup>th</sup> International Symposium FUELS 2014**, in Šibenik, October 16-17, 2014, and invites you to participate.

The symposium brings into focus fuels and all aspects related to their production, distribution and usage. Global changes in refining reflected on demand, and stringent European requirements to reduce hydrocarbons emissions, merged lead to one question: how to be competitive and survive? FUELS 2014 will try to give answers to these and other questions within the following topics:

- **Processing technologies and development trends in the production of fuels and biofuels, technological solutions and achievements in refining, fuel quality, process control, energy efficiency.**
- **Research related to the development of methods and procedures for testing and application of fuels and biofuels in accordance with quality requirements.**
- **Environment protection and legal framework of relations regulation in the oil industry.**

The **round table discussion** will be focused on the impact of environmental directives on refining, and on fuels and biofuels application with an emphasis on current results and future expectations.

---

**INSTRUCTIONS TO THE AUTHORS**

---

**Symposium Language** - The papers will be presented in English.

**Abstract** - Abstract may consist of up to half of a printed page. Abstracts in English and Croatian will be published in the Book of Abstracts.

The Organising Board will review all submitted abstracts and select those to be presented at the Symposium.

**Presentation of Papers** - The presentation of papers is limited to 15 min and comprises the use of customary audio-visual tools.

**Poster section** is also foreseen.

**Publishing of Papers** - The papers prepared in written form suitable for printing will be revised and published in *Fuels and Lubricants* periodical.

**Deadline** for Abstracts - May, 23<sup>th</sup> 2014.

**PAPER REGISTRATION FORM** you can find on [www.goma.hr](http://www.goma.hr)

**PARTICIPATION FEE**

**250 EUR** – for the participants

**80 EUR** – benefit fee for the first indicated author / speaker