



DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas lietuvių kalba	Dalyko (modulio) pavadinimas anglų kalba	Kodas
Spektroskopija	Spectroscopy	

Dėstytojas (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis: dr. Inga Čikotienė Kitas (-i):	Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Pirmoji	Privalomasis

Igyvendinimo forma	Vykdymo laikotarpis	Vykdymo kalba (-os)
Paskaitos, seminarai	4, 6 semestras	Lietuvių

Reikalavimai studijuojančiajam	
Išankstiniai reikalavimai: organinė chemija, fizika, kvantinė chemija	Gretutiniai reikalavimai (jei yra):

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
5	135	64	71

Dalyko (modulio) tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos			
Dalyko tikslas ugdyti studentų:			
<ul style="list-style-type: none"> - kritinį ir analitinį mąstymą - žinias ir supratimą apie spektroskopijos teorinius pagrindus ir spektroskopinės analizės metodus - gebėjimą taikyti įgytas žinias nustatant junginių struktūras, skaičiuojant molekulių charakteristikas 			
Programos numatomi studijų rezultatai	Dalyko (modulio) studijų siekiniai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
A1, A5, A7	- absolventas žinos ir supras spektroskopijos teorinius pagrindus bei svarbiausių molekulinės spektroskopijos metodų principus	Probleminis dėstymas Savarankiškas darbas	Egzaminas
C1, C2, C3	Absolventas gebės: <ul style="list-style-type: none"> - pasirinkti tinkamą spektroskopijos metodą konkrečiai problemai spręsti - gebės savarankiškai interpretuoti įvairių junginių spektrus - gebės kritiškai įvertinti analizės rezultatus 	Probleminis dėstymas Savarankiškas darbas	Egzaminas

Temos	Kontakt. darbo valandos	nt ak iš ka	Savarankiškų studijų laikas ir užduotys
-------	-------------------------	-------------	---

	Paskaitos	Seminarai	Pratybos	Lab. darbai	Praktika			Užduotys
1. Įvadas. Spektroskopijos rūšys. Elektromagnetinė spinduliuotė, jos sąveika su medžiaga.	1	1				2	5	Teorijos nagrinėjimas. Uždavinių sprendimas.
2. Elektroninė absorbcinė spektroskopija. Metodo fizikiniai pagrindai, aparatūra. Absorbcijos juostų prigimtis, elektronų perėjimai. EAS tyrimo objektai. Organinių junginių UV spektrai, jų struktūra, informacija gaunama iš spektrų. Tirpiklio, konjugacijos, struktūrinių pokyčių įtaka absorbcijos juostų intensyvumui bei padėčiai. Kompleksinių neorganinių junginių UV spektrai. Absorbcijos juostos, jų prigimtis. Krūvio pernašos juostos. EAS praktinis pritaikymas. Kiekybinė analizė.	4	4				8	6	Teorijos nagrinėjimas. Uždavinių sprendimas.
3. Vibracinė spektroskopija. Metodo principas. Molekulių ryšių virpesiai, jų matematinis aprašymas. Infraraudonoji spektroskopija. Artimoji, tolimoji, pagrindinė IR spinduliavimo sritys. IR spektrų interpretacija, valentinių, deformacinių virpesių sritys. Charakteringi funkcinių grupių svyravimų dažniai. Neorganinių junginių IR spektrai. Faktorai, turintys įtakos sugerties smailių padėčiai, pločiui, intensyvumui. Pavyzdžio paruošimas, aparatūra ir registravimo technikos. Ramano spektroskopija. Metodo esmė, tyrimo objektas. Informacija, gaunama iš Ramano spektrų. Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija.	6	6				12	16	Teorijos nagrinėjimas. Uždavinių sprendimas.
4. Mikrobanginė spektroskopija, rotaciniai spektrai, informacija gaunama iš rotacinių spektrų. Metodo taikymas bei apribojimai.	2	2				4	4	Teorijos nagrinėjimas. Uždavinių sprendimas.
5. BMR spektroskopija, jos principai, spektro registravimo būdai. Informacija, gaunama iš BMR spektrų. ¹ H BMR spektroskopija. Cheminis poslinkis. Deekranavimas elektroneigiamais elementais, vandeniliniiais ryšiais. Anizotropija. Sukinių sąveika. Signalų multipletumas. Sąveikos konstanta, jos skaičiavimas. Cheminis ir magnetinis branduolių ekvivalentiškumas. Sukinių sistemos, pirmos bei aukštesnės eilės spektrai. Nelygiaverčių sukinių sąveikos aprašymas, „medžio“	16	16				32	32	Teorijos nagrinėjimas. Uždavinių sprendimas.

diagramos. Protonų cheminiai poslinkiai ir struktūros ypatumai. Aukštesnės eilės ^1H BMR spektrų nagrinėjimas. Dinaminiai procesai BMR spektroskopijoje. ^{13}C BMR spektroskopija. ^{13}C cheminiai poslinkiai, sąveika su kitais branduoliais. Kitų branduolių (^{11}B , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P ir kt) spektroskopija, jos taikymas. 2D BMR spektroskopija. Kieto kūno BMR spektroskopija.								
6. Elektronų paramagnetinio rezonanso spektroskopija. Metodo principas, teoriniai pagrindai. EPR spektrų parametrai, g-faktorius. EPR spektrų smulkioji struktūra, spektrų interpretavimas. EPR spektroskopijos taikymas nustatant laisvuosius radikalus, pereinamųjų metalų jonus, tiriant polimerizacijos reakcijas.	1	1				2	3	Teorijos nagrinėjimas. Uždavinių sprendimas.
7. Masių spektrometrija, jos technika ir principai. Molekulinio jono gavimo būdai. Fragmentacijos taisyklės ir mechanizmai, informacija, gaunama iš masių spektrų. Masių spektrometrijos derinimas su chromatografija.	2	2				4	5	Teorijos nagrinėjimas. Uždavinių sprendimas.
	32	32				64	71	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
2 tarpiniai atsiskaitymai	40	Semestro metu	Testo tipo atsiskaitymai. Trumpi pasirinkimo, skaičiavimo, atviri klausimai.
Egzaminas	60	Sesijos metu	Uždavinių sprendimas ir atsakymai į teorinius klausimus.

Autorius	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidimo vieta ir leidykla	Prieiga internete ar VU bibliotekoje
Privalomoji literatūra					
P. Atkins, J. de Paula	2006	Atkin's Physical Chemistry		Oxford Uni. press	50
D. L. Pavia, G. M. Lampman, G. S. Kriz.	2001	Introduction to spectroscopy.		Thomson Learning	3
D. Mickevičius 1998.	1998	„Cheminės analizės metodai“, 1 tomas., (Chemical Analysis, Vol 1.)		Žiburio leidykla	50
Dalomoji paskaitų medžiaga					http://vma.esec.vu.lt
Papildoma literatūra					