

## DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Spektroskopiniai analizės metodai	Chemija N 003	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Analizinės ir aplinkos chemijos chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	2
Individualus	8	Seminarai	

### Dalyko anotacija

**Atominė absorbcinė spektrinė analizė (AAS).** Metodo teoriniai pagrindai. Atominės absorbcinės spektroskopijos analizės metodas atomizuojant mėginį liepsnoje. Aparatūra. Šviesos šaltiniai. Liepsna ir degikliai. Matavimo būdai. Metodo jautrumas. Atominės absorbcinės spektrinės analizės metodas naudojant elektroterminį mėginio sužadinimo variantą. Elektroterminių atomizatorių tipai. Analizės eiga. Išgarinimo mechanizmas ir mėginio atomizavimas grafitinėje kiuvetėje. Atominės absorbcinės spektrinės analizės metodo taikymas analizuojant įvairius ėminius.

**Induktyviai susietos plazmos optinės emisijos spektrometrija (ICP-OES).** Atominės emisinės spektrinės analizės sąvoka ir metodo apibrėžimas. Daugiaelementės analizės poreikis, atominės emisinės spektrinės analizės galimybės. Analizinio signalo formavimas. Spinduliavimo sužadinimo būdai. Plazminiai medžiagos atomizavimo ir spektrų sužadinimo šaltiniai. Kietų, skystų ir dujinių bandinių įvedimo galimybės, atomizacijos ir sužadinimo ypatybės, elementų tarpusavio įtaka. Analizuojamos medžiagos paėmimo ir paruošimo problema. Pagrindinės metodo charakteristikos, jų tyrimas, analizės metodikos parengimas, tobulinimas. Kiti emisijos sužadinimo variantai.

**Induktyviai susietos plazmos masių spektrometrija (ICP-MS).** Metodo teoriniai pagrindai, naudojama aparatūra. Metodo jautrumas. Pagrindiniai trukdantys faktoriai, metodo privalumai ir trūkumai. Analizės eiga ir metodo taikymas analizuojant įvairius ėminius.

**Atominė fluorescencinė spektroskopija.** Metodo teoriniai pagrindai. Analizinės charakteristikos. Aparatūra. Metodo pranašumai ir trūkumai.

**Molekulinė spektroskopija.** Optinių spektroskopijos metodų prigimtis ir sritys. Pagrindinės sąvokos. Molekulių elektroninė sandara. Kovalentinės molekulės energetiniai lygmenys, energetiniai perėjimai ir atitinkamos spektroskopijos rūšys.

**Elektroninė absorbcinė spektroskopija.** 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.

**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. Faktoriai, turintys įtakos sugerties smailių padėčiai, pločiui, intensyvumui. Pavyzdžio paruošimas, aparatūra ir registravimo technikos. Ramano sklaidos spektroskopija. Metodo esmė, tyrimo objektas. Informacija, gaunama iš Ramano spektrų. Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija.

**Masių spektrometrija.** Technika ir principai. Molekulinio jono gavimo būdai. Fragmentacijos taisyklės ir mechanizmai, informacija, gaunama iš masių spektrų. Masių spektrometrijos derinimas su chromatografija.

Įvairių tyrimo metodų racionalus derinimas.

### Pagrindinė literatūra

1. J. Nolte, ICP Emission Spectrometry; A practical guide, Wiley, 2003.
2. L. Ebdon, E.H. Evans, A. Fisher, S.J. Hill, An introduction to Analytical Atomic Spectrometry, Wiley, 1998.
3. J. A.C. Broekaert, Analytical Spectrometry with Flames and Plasmas, Wiley, 2002.
4. S.M. Nelms, ICP Mass Spectrometry Handbook, Blackwell Publishing, 2005.
5. L.H.J. Lajunen, P. Peramaki, Spectrochemical Analysis by Atomic Absorption and Emission, 2nd edition, The Royal Society of Chemistry, 2004.
6. H. Hesse, A. Meyer, A. Zeeh, Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, Thieme, 1997.
7. R. M. Silverstein, F.X. Webster, Spectroscopic identification of Organic Compounds, Wiley, 1997
8. P. Atkins, J. de Paula, "Atkin's Physical Chemistry", 2006.
9. D. Mickevičius „Cheminės analizės metodai“, 1 tomas., 1998
10. R. Kellner, J.M. Mermet, M. Otto, H.H. Widmer, Analytical chemistry, 1998

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Stasys Tautkus	Prof.	<p>1. A. Kizalaite, V. Brimiene, G. Brimas, J. Kiuberis, S. Tautkus, A. Zarkov, A. Kareiva, Determination of trace elements in adipose tissue of obese people by microwave-assisted digestion and inductively coupled plasma optical emission spectrometry, <i>Biological Trace Element Research</i> 189 (2019) 10-17.</p> <p>2. L. Sinusaite, I. Grigoraviciute-Puroniene, A. Popov, K. Ishikawa, A. Kareiva, A. Zarkov, Controllable synthesis of tricalcium phosphate (TCP) polymorphs by wet precipitation: effect of washing procedure, <i>Ceramics International</i> 45 (2019) 12423-12428.</p>
Aleksej Žarkov	Dr.	<p>3. P. Konieczynski, A. Zarkov, A. Viapiana, M. Kaszuba, L. Bielski, M. Wesolowski, Investigations of metallic elements and phenolics in Chinese medicinal plants, <i>Open Chemistry</i> 18(1) (2020) 1381-1390.</p> <p>4. L. Sinusaite, A. Popov, E. Raudonyte-Svirbutaviciene, J.-C. Yang, A. Kareiva, A. Zarkov, Effect of Mn doping on hydrolysis of low-temperature synthesized metastable alpha tricalcium phosphate, <i>Ceramics International</i> 47(9) (2021) 12078-12083.</p> <p>5. D. Karoblis, A. Zarkov, E. Garskaite, K. Mazeika, D. Baltrunas, G. Niaura, A. Beganskiene, A. Kareiva, Study of gadolinium substitution effects in hexagonal yttrium manganite <math>YMnO_3</math>, <i>Scientific Reports</i> 11(1) (2021) 2875.</p>

Patvirtinta Vilniaus universiteto ir Fizinių ir technologijos mokslų centro Chemijos mokslo krypties doktorantūros komitete 2021 m. rugsėjo 28 d., protokolo Nr. 610000-KT-142.

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva