STUDIJŲ DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
Spektroskopija	

Dėstytojas / a (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis (-i): Ieva Žutautė **Kitas / a (-i):** Rita Bukšnaitienė, Viktoras Masevičius, Indrė Misiūnaitė	Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Organinės chemijos katedra, Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Pirmoji	Privalomasis

Įgyvendinimo forma	Vykdymo laikotarpis	Vykdymo kalba (-os)
auditorinė	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		
Dalyko tikslas ugdyti studentų: - 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		
Dalyko (modulio) studijų rezultatai	**Studijų metodai**	**Vertinimo metodai**
A1, A5, A7. Absolventas žinos ir supras spektroskopijos teorinius pagrindus bei svarbiausių molekulinės spektroskopijos metodų principus	Paskaitos, Probleminis dėstymas Savarankiškas darbas	Tarpinis atsiskaitymas, Egzaminas
B2, B4. Absolventas gebės parinkti tinkamus instrumentinių tyrimų metodus medžiagos struktūros tyrimams atlikti bei interpretuoti gautus tyrimo duomenis.	Paskaitos, Probleminis dėstymas Savarankiškas darbas	Tarpinis atsiskaitymas, Egzaminas
C1, C2, C3. Absolventas gebės: pasirinkti tinkamą spektroskopijos metodą konkrečiai problemai spręsti; gebės savarankiškai interpretuoti įvairių junginių spektrus; gebės kritiškai įvertinti analizės rezultatus.	Paskaitos, Probleminis dėstymas Savarankiškas darbas	Tarpinis atsiskaitymas, Egzaminas

Temos	Kontaktinio darbo valandos							Savarankiškų studijų laikas ir užduotys	
	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Laboratoriniai darbai	Praktika	**Visas kontaktinis darbas**	**Savarankiškas darbas**	**Savarankiškai atliekamos 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. Faktoriai, turintys įtakos sugerties smailių padėčiai, pločiui, intensyvumui. Pavyzdžio paruošimas, aparatūra ir registravimo technikos. Ramano spektroskopija. Metodo esmė, tyrimo objektas. Inormacija, 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, vandeniliniais 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“ diagramos. Protonų cheminiai poslinkiai ir struktūros ypatumai. Dinaminiai procesai BMR	16		16				32	**32**	Teorijos nagrinėjimas. Uždavinių sprendimas.

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. 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.
Iš viso	**32**		**32**				**64**	**71**	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Tarpinis atsiskaitymas	40	Semestro metu	Testo tipo atsiskaitymas. Trumpi pasirinkimo, skaičiavimo, atviri klausimai. Vertinimas proporcingas surinktų taškų sumai. Gauta taškų suma pervedama proporcingai maksimaliai į keturis balus, kurie pridedami prie surinktų egzamino balų.
Egzaminas	60	Sesijos metu	Uždavinių sprendimas ir atsakymai į teorinius klausimus. Vertinimas proporcingas surinktų taškų sumai. Gauta taškų suma pervedama proporcingai maksimaliai į šešis balus. Galutinis dalyko vertinimas yra abiejų atsiskaitymų suma. Žinios vertinamos 10 balų skalėje: 9 – 10 balų – žinios įsisavintos puikiai, raštu atsakyta virš 90% klausimų; 7 – 8 balų – Studentas gerai įsisavino kurso medžiagą; 5 – 6 balų – žynių lygis patenkinamas, studentas įsisavino kurso pagrindus. 0 – 4 balų – studentas neįsisavino reikalingo minimalaus žinių kiekio, raštu atsakytų klausimų kiekis nesiekė 45 %.

Autorius (-iai)	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidykla ar internetinė nuoroda
Privaloma literatūra				
P. Atkins, J. de Paula	2006	Atkin's Physical Chemistry		Oxford Uni. press
D. L. Pavia, G. M. Lampman, G. S. Kriz.	2001	Introduction to spectroscopy.		Thomson Learning
D. Mickevičius 1998.	1998	„Cheminės analizės metodai"	1 tomas	Žiburio leidykla
Papildoma literatūra				
G. Buika, V. Getautis, V. Martynaitis, K. Rutkauskas	2007	Organinių junginių spektroskopija		Vitae Litera

COURSE UNIT (MODULE) DESCRIPTION

Course unit (module) title	Code
Spectroscopy	

Academic staff	Core academic unit(s)
Coordinating: Ieva Žutautė **Other:** Rita Bukšnaitienė, Viktoras Masevičius, Indrė Misiūnaitė	Faculty of Chemistry and Geosciences, Institute of Chemistry, Department of Organic Chemistry, Naugardukas str. 24, LT-03225 Vilnius

Study cycle	Type of the course unit
First	Compulsory

Mode of delivery	Semester or period when it is delivered	Language of instruction
Face-to-face	4th and 6th semester	Lithuanian

Requisites	
Prerequisites: Physics, organic chemistry, quantum chemistry	**Co-requisites (if relevant):**

Number of ECTS credits allocated	Student's workload (total)	Contact hours	Individual work
5	135	64	71

Purpose of the course unit

The aim of the course is to cultivate students' abilities:

- critical and analytical thinking
- knowledge and understanding of the theoretical principles of spectroscopy and spectroscopic analysis methods
- ability to apply acquired knowledge in determining compound structures and calculating molecular characteristics

Learning outcomes of the course unit	Teaching and learning methods	Assessment methods
A1, A5, A7. Student will know and understand the theoretical foundations of spectroscopy as well as the principles of the most important methods of molecular spectroscopy.	Lectures, problem-based learning, independent work	Intermediate assessment Exam
B2, B4. Student will be able to choose appropriate instrumental methods for the examination of the structure of a material, interpret the data of this examination.	Paskaitos, Probleminis dėstymas Savarankiškas darbas	Tarpinis atsiskaitymas, Egzaminas
C1, C2, C3. Student will be able to: • Choose the appropriate spectroscopic method to solve a specific problem • Independently interpret spectra of various compounds • Critically evaluate analysis results	Lectures, problem-based learning, independent work	Intermediate assessment Exam

Content	Contact hours							Individual work: time and assignments	
	Lectures	Tutorials	Seminars	Workshops	Laboratory work	Internship	**Contact hours, total**	**Individual work**	**Tasks for individual work**
1. Introduction. Types of Spectroscopy. Electromagnetic Radiation and Its Interaction with Matter.	1		1				2	**5**	Theoretical analysis. Problem solving.
2. Electronic Absorption Spectroscopy. Physical principles of the method, equipment. Nature of absorption bands, electron transitions. Objects of EAS research. UV spectra of organic compounds, their structure, information obtained from spectra. Influence of solvent, conjugation, structural changes on the intensity and position of absorption bands. UV spectra of complex inorganic compounds. Absorption bands, their nature. Charge transfer bands. Practical application of EAS. Quantitative analysis..	4		4				8	**6**	Theoretical analysis. Problem solving.
3. Vibrational Spectroscopy. Principle of the method. Vibrations of molecular bonds, their mathematical description. Infrared Spectroscopy. Near, far, fundamental IR spectral regions. Interpretation of IR spectra, regions of stretching, bending vibrations. Characteristic frequencies of functional group vibrations. IR spectra of inorganic compounds. Factors affecting the position, width, intensity of absorption peaks. Sample preparation, equipment, and recording techniques. Raman Spectroscopy. Essence of the method, object of research. Information obtained from Raman spectra. Surface-enhanced Raman Spectroscopy.	6		6				12	**16**	Theoretical analysis. Problem solving.
4. Microwave Spectroscopy, rotational spectra, information obtained from rotational spectra. Application of the method and limitations.	2		2				4	**4**	Theoretical analysis. Problem solving.
5. NMR Spectroscopy, its principles, methods of spectrum recording. Information obtained from NMR spectra. ^{1}H NMR Spectroscopy. Chemical shift. Shielding by electronegative elements, hydrogen bonding. Anisotropy. Spin-spin interaction. Multiplet signals. Coupling constant, its calculation. Chemical and magnetic equivalence of nuclei. Spin systems, first and higher order spectra. Description of inequivalent spins interactions, "tree" diagrams. Chemical	16		16				32	**32**	Theoretical analysis. Problem solving.

shifts of protons and structural features. Dynamic processes in NMR spectroscopy. ^{13}C NMR Spectroscopy. ^{13}C chemical shifts, interaction with other nuclei. Spectroscopy of other nuclei (^{11}B, ^{15}N, ^{19}F, ^{31}P, etc.) and its applications. Solid-state NMR spectroscopy.									
6. Electron Paramagnetic Resonance (EPR) Spectroscopy. Principle of the method, theoretical foundations. Parameters of EPR spectra, g-factor. Fine structure of EPR spectra, spectrum interpretation. Application of EPR spectroscopy in detecting free radicals, transition metal ions, studying polymerization reactions.	1		1				2	**3**	Theoretical analysis. Problem solving.
7. Mass Spectrometry, its technique and principles. Methods of obtaining molecular ions. Rules and mechanisms of fragmentation, information obtained from mass spectra. Integration of mass spectrometry with chromatography.	2		2				4	**5**	Theoretical analysis. Problem solving.
Total	**32**		**32**				**64**	**71**	

Assessment strategy	Weight %	Deadline	Assessment criteria
Intermediate assessment	40	During the semester	Test-type assessments. Short answer, calculation, open-ended questions. Evaluation proportional to the total points earned. The obtained amount of points is proportionally transferred to a maximum of four points, which are added to the collected exam points.
Exam	60	During the session	Solving problems and providing answers to theoretical questions. Evaluation proportional to the total points earned. The received amount of points is proportionally transferred to a maximum of six points. The final subject assessment is the sum of both settlements. Knowledge is assessed on a scale of 10 points: 9 – 10 points – the knowledge has been mastered perfectly, more than 90% of the questions have been answered in writing; 7 – 8 points – the student has mastered the course material well; 5 – 6 points – the level of proficiency is satisfactory, the student has mastered the basics of the course. 0 – 4 points – the student did not acquire the required minimum amount of knowledge, the amount of questions answered in writing did not reach 45%.

Author (-s)	Publishing year	Title	Issue of a periodical or volume of a publication	Publishing house or web link
Required reading				
P. Atkins, J. de Paula	2006	Atkin's Physical Chemistry		Oxford Uni. press
D. L. Pavia, G. M. Lampman, G. S. Kriz	2001	Introduction to spectroscopy.		Thomson Learning
D. Mickevičius	1998	„Cheminės analizės metodai" (Chemical Analysis)	Vol 1	Žiburio leidykla
Recommended reading				
G. Buika, V. Getautis, V. Martynaitis, K. Rutkauskas	2007	Organinių junginių spektroskopija (Spectroscopy of organic compounds)		Vitae Litera
