



STUDIJŲ DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
Optinė ir magnetinių rezonansų spektroskopija	

Dėstytojas (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis: doc. Justinas Čeponkus Kitas (-i): prof. Vytautas Balevičius lekt. Rasa Platakytė	VU Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9/III, Vilnius

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Pirmoji	Privalomasis

Igyvendinimo forma	Vykdyto laikotarpis	Vykdyto kalba (-os)
Auditorinė	7 semestras	Lietuvių

Reikalavimai studijuojančiajam	
Išankstiniai reikalavimai: Studentas turi būti išklausęs kursus: Bendroji fizika, Bendroji chemija, Kvantinė mechanika	Gretutiniai reikalavimai (jei yra):

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
5	140	80	60

Dalyko (modulio) tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos
Tikslas – įgyti žinių ir gebėjimų, reikalingų suprasti ir paaiškinti procesus vystančius atomuose ir molekulėse. Bei šių sistemų bei reiškinų vystančių juose tyrimus pasinaudojant spektriniais metodais. Taip pat įgyti praktinių įgūdžių dirbant su šiuolaikine spektrometrijos įranga. Susipažinti su spektrinių duomenų apdorojimo ir analizės metodika.

Dalyko (modulio) studijų siekiniai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
Įgyti teorinių ir praktinių molekulių spektrometrijos žinių. Suprasti ir gebėti paaiškinti procesus vykstančius molekulių sistemose. Gebėti pritaikyti fizikos mokslo ir informacinių technologijų žinias, molekulių sistemų tyrimui. Žinoti pagrindinių spektrinių tyrimo metodų taikymo galimybes; gebėti įvertinti kokius spektrinius metodus ir įrangą tiktų įvairių sistemų (pavienių molekulių, skysčių biologinių darinių,) tyrimui; tinkamai interpretuoti eksperimentinių tyrimų rezultatus.	Paskaita, probleminių uždavinių sprendimas, laboratoriniai darbai, konsultacijos, savarankiškas darbas .	Apklausa žodžiu - laboratorinių darbų rezultatų analizė. Dalyko pabaigoje – egzaminas raštu.

Temos	Kontaktinio darbo valandos							Savarankiškų studijų laikas ir užduotys	
	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Laboratoriniai darbai	Praktika	Visas kontaktinis darbas	Savarankiškas darbas	Užduotys
1. Spektras ir spektrinis eksperimentas. Spekro sąvoka. Spinduliuotė, sugertis, dispersija. Spektrinė juosta ir spektrinė linija. Spektrinės juostos plotis ir išplitimo priežastys. Natūralusis, Doplerio, smūginis išplitimai.	2							1	Skaityti literatūrą paskaitos tema.
2. Spektrinių prietaisų rūšys, jų aparatinės funkcijos. Dispersiniai ir interferenciniai spektrometrai. Furjė vaizdavimo principai. Prietaiso aparatinė funkcija. Apodizacijos funkcijos ir jų paskirtis. Spektrinių prietaisų elementai. Šviesos šaltiniai. Jutikliai. Optinės medžiagos, jų apdirbimo būdai.	3							2	Skaityti literatūrą paskaitos tema
3. Atominė spektrometrija. Atomai ir atomų energijos lygmenys. Vandeniliškieji atomai. Atomų spektrometrijos technika ir taikymai medžiagų struktūrinei analizei	3							2	Skaityti literatūrą paskaitos tema
4. Elektroniniai šuoliai molekulėse. Elektroninės būsenos ir cheminis ryšys molekulėse. Hibridinės s ir p orbitalės. Molekulių termai. Elektroniniai šuoliai. Elektroninių energijos lygmenų vidinė sandara. Franko – Kondono principas.	3							2	Skaityti literatūrą paskaitos tema
5. Dviatomių molekulių elektroniniai spektrai. Dviatomių molekulių sugerties juostų intensyvumas, progresijos, sekvencijos. Spektrų interpretavimas. Deslandres lentelės.	3							2	Skaityti literatūrą paskaitos tema
6. Daugiaatomių molekulių elektroniniai spektrai. Daugiaatomių molekulių elektroninių juostų būdingumas. Fluorescencija, fosforescencija, termofluorescencija Energinis ir kvantinis liuminescencijos našumai. Jablonskio diagrama.	2							2	Skaityti literatūrą paskaitos tema
7. Virpesinės molekulių spektrometrijos teoriniai pagrindai. Dviatomių molekulių virpesiai klasikinės mechanikos ir kvantinės teorijos artiniu. Infraraudonosios spinduliuotės sugerties ir spinduliavimo dėsniniai. Rotaciniai ir virpesiniai dviatomių molekulių spektrai.	4							2	Skaityti literatūrą paskaitos tema
8. Daugiatomių molekulių virpesinė spektrometrija. Molekulių virpesiai. Molekulių laisvės laipsniai. Virpesinio uždavinio sprendimas Dekarto ir vidinių koordinačių bazėse.	4							2	Skaityti literatūrą paskaitos tema
9. Molekulių simetrija ir jos taikymas virpesinėje analizėje. Simetrijos elementai, operacijos ir taškinės grupės. Simetrijos operacijų taikymas molekulių virpesiams. Charakterių lentelės. Atrankos taisyklės.	4							3	Skaityti literatūrą paskaitos tema
10. Daugiatomių molekulių eksperimentiniai virpesiniai spektrai. Virpesinių juostų rotacinė struktūra. Anharmoniškumas, virštoniai sudėtiniai dažniai Fermi rezonansas. Ramano sklaidos spektrinės juostos ir jų poliarizacija. Rezonansinė ir netiesinė Ramano sklaida.	4							2	Skaityti literatūrą paskaitos tema

11. Branduolių magnetinio rezonanso (BMR) spektrometrijos teoriniai pagrindai. Branduolio magnetinio momento ir magnetinio lauko sąveika. Branduolių relaksacija. Makroskopinė BMR teorija. Blocho (F.Bloch) lygtys ir jų sprendimas, taikant laboratorines ir besisukančias koordinacinių sistemas.	5							2	Skaityti literatūrą paskaitos tema	
12. BMR eksperimento technika ir duomenų analizė. Branduolių rezonansinių signalų plotis ir kontūras. Nuostovieji ir impulsiniai magnetinio rezonanso signalų registravimo metodai. BMR Furjė (J.B. Fourier) spektroskopija dujiniuose, skystuose ir kietuosiuose kūnuose. BMR spektroskopijos taikymas fizikoje, biofizikoje, chemijoje.	6							3	Skaityti literatūrą paskaitos tema	
13. Elektronų paramagnetinio rezonanso (EPR) spektrometrija. EPR esmė ir tyrimo objektai. EPR spektrų smulkioji struktūra. Įvairių grupių jonų, laisvųjų radikalų ir F centrų EPR spektrai. EPR spektrometrai	5							3	Skaityti literatūrą paskaitos tema	
Kurso metu atliekami 8 laboratoriniai darbai: 1. Kiekybinė organinių junginių analizė iš elektroninių sugerties spektrų. 2. Dviatominių molekulių elektroninių sugerties ir rezonansinės fluorescencijos spektrų tyrimas. 3. Infraraudonosios sugerties spektrų registravimas spektrometru su Furjė vaizdavimu. 4. Kokybinė spektrinė analizė iš Ramano sklaidos spektrų. 5. Dviatominių molekulių rotacinių konstantų nustatymas iš virpesinių-rotacinių spektrų. 6. Etanolio ir metanolio vandeninio tirpalo kiekybinė analizė infraraudonosios sugerties spektrometrijos metodu. 7. Branduolių magnetinio rezonanso spektrų registravimas ir analizavimas BMR spektrometru BRUKER AVANCE III HD. 8. Elektronų paramagnetinio rezonanso spektrų registravimas ir analizavimas EPR spektrometru BRUKER ELEXSYS E 500.				32				32	Skaityti laboratorinio darbo metodikos aprašą ir literatūrą laboratorinio darbo tema. Pagal pateiktus reikalavimus parengti darbo aprašą.	
Iš viso	48				32			80	60	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Laboratoriniai darbai (L)	25	2-16 semestro savaitės	Atliktas laboratorinis darbas, sutvarkytas aprašas- 5 (silpnai) Atliktas laboratorinis darbas, sutvarkytas aprašas ir atsakytas 1 klausimas - 6 (patenkinamai) Atliktas laboratorinis darbas, sutvarkytas aprašas ir atsakyti 2 klausimai - 7(vidutiniškai) Atliktas laboratorinis darbas, sutvarkytas aprašas ir atsakyti 3 klausimai - 8 (gerai) Atliktas laboratorinis darbas, sutvarkytas aprašas ir atsakyti 4 klausimai - 9 (labai gerai) Atliktas laboratorinis darbas, sutvarkytas aprašas ir atsakyti 5 klausimai - 10 (puikiai)
Atsiskaitymas raštu temos 1-6 (A1)	25	5 semestro savaitė	5 trumpi teorijos/praktinių užduočių klausimai į kuriuos reikia atsakyti iki 10 sakinių, atsakymui gali reikėti formulės ar aiškinamojo brėžinio. Kiekvienas teisingai atsakytas klausimas vertinamas 2 balais neteisingai 0 balu. Galutinis balas teisingai atsakytų klausimų suma.
Atsiskaitymas raštu, temos 7-10 (A2)	25	10 semestro savaitė	5 trumpi teorijos/praktinių užduočių klausimai į kuriuos reikia atsakyti iki 10 sakinių, atsakymui gali reikėti formulės ar

			aiškinamojo brėžinio. Kiekvienas teisingai atsakytas klausimas vertinamas 2 balais neteisingai 0 balu. Galutinis balas teisingai atsakytų klausimų suma.
Atsiskaitymas raštu, temos 11-13 (A3)	25	16 semestro savaitė	5 trumpi teorijos/praktinių užduočių klausimai į kuriuos reikia atsakyti iki 10 sakinių, atsakymui gali reikėti formulės ar aiškinamojo brėžinio. Kiekvienas teisingai atsakytas klausimas vertinamas 2 balais neteisingai 0 balu. Galutinis balas teisingai atsakytų klausimų suma.
Galutinis vertinimas	100	Egzaminų sesija	Dešimtbalė kaupiamoji vertinimo schema. Bendras dalyko įsisavinimo vertinimas susideda iš laboratorinių darbų (L) ir atsiskaitymų raštu (A1, A2, A3) vertinimų. Dėl pateisinamų priežasčių praleidus vieną iš atsiskaitymų egzamino dieną studentui suteikiama galimybė jį parašyti. Dalyko vertinimas: $P = 0,25L + 0,25 A1 + 0,25 A2 + 0,25 A3$

Autorius	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidimo vieta ir leidykla ar internetinė nuoroda
Privaloma literatūra				
V. Šablinskas, J. Čeponkus	2014	Modernioji molekulių virpesinė spektrometrija		VU, Vilnius http://www.bfsk.ff.vu.lt/links.php
A. Gruodis	2008	Liuminescencija		BMK, Vilnius
V. Balevičius, L. Kimtys, G. Misiūnas.	2000	Magnetinio rezonanso spektrometrija.		VU, Vilnius
Papildoma literatūra				
J. M Hollas.	2007	Modern spectroscopy		John Wiley Sons, Chichester
V. Vaičiškuskas ir kt.	2008	Paviršiaus optinė spektroskopija		TEV, Vilnius