

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Kurso pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas, institutas	Katedra skyrius
Spektroskopiniai analizės metodai	Chemija 03P	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Analizinės ir aplinkos chemijos chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
paskaitos		konsultacijos	3
individualus	7,5	seminarai	

Dalyko anotacija

Atominė emisinė spektrinė analizė (AES). Atominės emisinės spektrinės analizės sąvokos ir metodų apibrėžimai bei jų klasifikacija. 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. AESA metodų ypatybės, analizės metodo paruošimas. Analizuojamos medžiagos paėmimo ir paruošimo problema. Pagrindinės metodų charakteristikos, jų tyrimas, analizės metodikos parengimas, tobulinimas.

Atominė absorbcinė spektrinė analizė (AASA). 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.

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.

Mikrobanginė spektroskopija, rotaciniai spektrai, informacija gaunama iš rotacinių spektrų. Metodo taikymas bei apribojimai.

BMR spektroskopija, jos principai, spektro registravimo būdai. Informacija, gaunama iš BMR spektrų. ¹H BMR spektroskopija. Cheminis poslinkis. Deekranavimas elektroneigiamais elementais, vandenilniais ryšiais. Anizotropija. Sukinių saveika. 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. Aukštesnės eilės ¹H BMR spektrų nagrinėjimas. Dinaminiai procesai BMR spektroskopijoje. ¹³C BMR spektroskopija. ¹³C cheminiai poslinkiai, sąveika su kitais branduoliais. Kitų branduolių (¹¹B, ¹⁵N, ¹⁹F, ³¹P ir kt) spektroskopija, jos taikymas. 2D BMR spektroskopija. Kieto kūno BMR spektroskopija.

Elektronų paramagnetinio rezonanso spektroskopija. Metodo principas, teoriniai pagrindai. EPR spektrų smulkioji struktūra, spektrų interpretavimas. EPR spektroskopijos taikymas nustatant

laisvuosius radikalus, pereinamųjų metalų jonus, tiriant polimerizacijos reakcijas.
Masių spektrometrija, jos 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. H. Hesse, A. Meyer, A. Zeeh, Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, Thieme, 1997.
2. R. M. Silverstein, F.X. Webster, Spectroscopic identification of Organic Compounds, NY, John Willey, 1997
3. P. Atkins, J. de Paula, "Atkin's Physical Chemistry", 2006.
4. D. Mickevičius „Cheminės analizės metodai“, 1 tomas., 1998
5. R. Kellner, J.M. Mermet, M. Otto, H.H. Widmer, Analytical chemistry, 1998
6. Ю.Я. Кузяков, К.А.Семенов, Н.Б.Зоров. Методы спектрального анализа, 1990
7. Jose A.C. Broekaert. Analytical atomic spectrometry with flames and plasmas, 2005

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Stasys Tautkus	(HP) dr.	prof..	<p>1. S. Tautkus, L. Steponienė, R. Kazlauskas. Accumulation of cadmium and zinc in bottom sediments of different waters of Lithuania, J.Serb,Chem. Soc., 2007, 72, 579-583.Soc.,</p> <p>2. G. Nenartaviciene, A. Beganskiene, S. Tautkus, D. Jasaitis, A. Kareiva. Chromium substitution effects in Y-124 superconductor prepared by aqueous sol-gel method, Chemical Physics, 2007, 332, 225-231.</p> <p>3. A. Irnius, D. Speiciene, S. Tautkus, A. Kareiva. Distribution of sodium, potassium, magnesium and calcium in blood plasma, Mendeleev Communications, 2007, 17, 1-2.</p> <p>4. S. Tautkus, D. Uzdaviniene, I. Pakutinskiene, R. Kazlauskas, E. Zalieckiene. Determination of strontium in milk by flame atomic absorption spectrometry, Polish J. Of Environ. Stud., 2007, 16, 785-789.</p> <p>5. J. Bagdzeviciene, S. Tautkus, J. Senvaitiene, J. Luksiene. Investigation of the technique of painting on a tin alloy plate, Chemija, 2009, 20, 93-100.</p>
Inga Čikotienė	dr.	Prof.	<p>1. <u>I. Cikotienė</u>, R. Buksnaitienė, R. Sazinas, Rapid Access to Benzo-annulated Heterocycles, Naphthalenes and Polysubstituted Benzenes through a Novel Benzannulation Reaction, <i>Tetrahedron</i>, 2011, 67, 706 – 717.</p> <p>2. <u>I. Cikotienė</u>, R. Sazinas, R. Mazeikaite, L. Labanauskas, Unexpected Regioselectivity in Cycloisomerization of 2-Alkynyl-3-nitrothiophenes, <i>Synlett</i>, 2010, 3027 - 3030.</p> <p>3. E. Pudziulevityte, C. Ríos-Luci, L. G. León, <u>I. Cikotienė</u> and J. M. Padrón, Synthesis and Antiproliferative Activity of 2,4-Disubstituted 6-Aryl-7H-pyrrolo[3,2-d]pyrimidin-7-one 5-Oxides, <i>Bioorg. Med. Chem.</i>, 2009, 17, 4955 - 4960.</p>

		<p>4. <u>I. Cikotiene</u>, V. Kairys, R. Buksnaitiene, M. Morkunas, S. Rudys, A. Brukstus, M. X. Fernandes, Study on the cyclization of 6-arylethynylpyrimidine-5-carbaldehydes with <i>tert</i>-butylamine: microwave <i>versus</i> thermal preparation of pyrido[4,3-<i>d</i>]pyrimidines, <i>Tetrahedron</i>, 2009, 65, 5752 - 5759.</p> <p>5. <u>I. Cikotiene</u>, M. Morkunas, S. Rudys, R. Buksnaitiene, A. Brukstus; An Efficient One-Pot Synthetic Method of 2,4-Disubstituted 7-Arylpyrido[4,3-<i>d</i>]pyrimidines from 2,4-Disubstituted 6-Arylethynylpyrimidine-5-carbaldehydes and <i>tert</i>-Butylamine, <i>Synlett</i>, 2008, 18, 2799 - 2802.</p>
--	--	--

Patvirtinta Chemijos m. krypties Doktorantūros komitete 2017 m. rugsėjo 21 d., protokolo Nr. 610000-DP-44.

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva.