**DAUGAVPILS UNIVERSITĀTES**

**STUDIJU KURSA APRAKSTS**

|  |  |
| --- | --- |
| Studiju kursa nosaukums | Spektroskopija |
| Studiju kursa kods (DUIS) | Ķīmi5032 |
| Zinātnes nozare | **Ķīmija** |
| Kursa līmenis |  |
| Kredītpunkti | 2 |
| ECTS kredītpunkti | 3 |
| Kopējais kontaktstundu skaits | 32 |
| Lekciju stundu skaits | 16 |
| Semināru stundu skaits | 16 |
| Praktisko darbu stundu skaits | 0 |
| Laboratorijas darbu stundu skaits | 0 |
| Studējošā patstāvīgā darba stundu skaits | 48 |
|  | |
| Kursa autors(-i) | |
| Dr. ķīm., vad. pētn., doc. Jeļena Kirilova | |
| Kursa docētājs(-i) | |
| Dr. ķīm., vad. pētn., doc. Jeļena Kirilova | |
| Priekšzināšanas | |
| Ķīmi5002 Organiskā ķīmija; | |
| Studiju kursa anotācija | |
| KURSA MĒRĶIS:  Attīstīt studentos aktīvo un radošo attieksmi pret mācību procesu, sniegt mūsdienu priekšstatu par organisko vielu spektroskopiju un prasmes tās lietot organisko savienojumu struktūras noskaidrošanā. Dot zināšanas par spektroskopijas metožu izmantošanu kvalitatīvajā un kvantitatīvajā analīzē, kā arī paplašināt iepriekš bakalaura programmā apgūtās zināšanas ķīmijā.  Iepazīt studentus ar organisko savienojumu spektroskopijas pētīšanas metodēm. Praktisku darbu laikā attīstīt un nostiprināt zinātniskā darba prasmes un iemaņas ķimisku savienojumu pētījumu veikšanā.  KURSA UZDEVUMI:  1. Iepazīstināt studējošos ar kodolu magnētiskās rezonanses un infrasarkano spektroskopiju, to saistību ar pētāmās vielas struktūru;  2. Dot studējošiem ieskatu par spektru reģistrēšanas aparatūru un spektru datu interpretāciju;  3. Nodrošināt studējošiem iemaņas organisko vielu strukturas noteikšanā, izmantojot  spektru datus;  4. Veicināt studējošo patstāvīgā darba iemaņu stiprināšanu darbam ar zinātniskās literatūras izpēti;  5. Veicināt studējošo iemaņu stiprināšanu darba organizācijā, plānošanā, atbilstošo metožu izvēlē, to pielietošanu profesionālajā darbībā. | |
| Studiju kursa kalendārais plāns | |
| L16, S16, Pd48  1. Mūsdienu spektroskopijas vispārīgs pārskats: no gamma starojuma līdz radioviļņiem. Molekulārā spektroskopijas principi. Molekulas elektroniskās, vibrācijas un rotācijas kustības. Spektru reģistrēšanas aparatūra. Mūsdienu spektroskopijas galvenie uzdevumi, metodes un attīstības virzieni. L2, Pd6  2. Vibrāciju spektroskopijas vispārīgie principi un pamatmetodes. Infrasarkanās spektroskopijas principi. Kvalitatīvā un kvantitatīvā analīze. Eksperimenta metodes un tehnika, praktiskie uzdevumi. L2, S2, Pd6  3. Virstoni un salikti toņi. Vibrāciju pāreju izpausme infrasarkanā un Ramana spektroskopijā. Ramana spektroskopijas principi, loma un speciālie uzdevumi. L2, Pd6  4. Elektronu spektroskopija. Elektronisko pāreju vibrācijas struktūra - vibroniskie spektri. Luminiscences spektru saikne ar absorbcijas spektriem. Stoksa likums un Levšina spoguļsimetrijas noteikums, iekšējā konversija. Luminiscences kvantu iznākums. Vavilova likums. Luminiscences spektroskopijas galvenie uzdevumi, metodes un attīstības virzieni. L2, S2, Pd6  5. Atomu kodolu magnētiskās īpašības. Magnētiski aktīvie kodoli: 1H, 13C, 19F, 29Si, 31P u.c. Kodolu spina moments un magnētiskais moments. Kodolu magnētiskās rezonanses parādība un noteikumi. KMR spektrometra principiālā shēma un darbības režīmi. L2, S2, Pd6  6. 1H-KMR spektroskopija. Deiterētie šķīdinātāji. Spektra raksturlielumi: signālu ķīmiskā nobīde, signālu intensitāte, signālu multiplicitāte. Empīriskas likumsakarības aizvietotāju ietekmes prognozēšanai: alkāni, alkēni, arēni. L2, S2, Pd6  7. Priekšstats par spinu mijiedarbības mehānismu. Signālu multiplicitāte. Spinu mijiedarbības konstante. 13C-KMR spektroskopija. 13C- 1H-spinu mijiedarbība, tās izmantošana oglekļa atoma hibridizācijas stāvokļa noteikšanai. Struktūras faktoru ietekme uz 13C-KMR signālu ķīmisko nobīdi. L2, S2, Pd6  8. 1H, 13C-KMR izmantošana organisko savienojumu struktūranalīzē. Dažādu spektru veidu interpretācija. L2, S6, Pd6  L - lekcija  S – semināri  Pd – patstāvīgais darbs | |
| Studiju rezultāti | |
| ZINĀŠANAS:  1. izprot spektroskopijas jēdzienus, metožu iespējas un lietošanas sfēras ķīmijā;  2. izprot molekulārās struktūras ietekmi uz spektroskopiskiem datiem;  3. demonstrē zināšanas par modernām metodēm un tehnoloģijām spektroskopijā;  4. prot izvēlēties spektroskopiskās analīzes metodi konkrētu mērķu sasniegšanā;  5. pārzina instrumentālo metožu pielietošanu kvantitatīvajā vai kvalitatīvajā analīzē;  6. demonstrē vispusīgas faktu, teoriju un likumsakarību zināšanas par ķīmiskos savienojumu struktūru raksturošanu, izmantojot modernas laboratorijas metodes nezināma ķīmiska savienojuma struktūras noteikšanai;  PRASMES:  7. prot pēc dotajiem spektriem noteikt vielas struktūrformulu;  8. skaidro spektru rezultātus („lasa” spektrus);  9. prot veikt vielu kvalitatīvo un/vai kvantitatīvo analīzi, lietojot spektrskopijas datus;  10. prot pamatot attiecīgo metožu un aparatūras pielietojumu;  11. prot iegūtās zināšanas pielietot praksē: atšifrēt nezināmas vielas struktūru, izmantojot vairāku (2-3) dažādu spektru datus un elementanalīzes rezultātus;  12. prot lietot zinātniskās literatūras datu bāzes (t.sk. SCOPUS, WoS, ScienceDirect u.c);    KOMPETENCES:  13. spēj izmantot iegūto prasmi – sagatavot un veikt eksperimentu, novērtēt rezultātus – tālākā praktiskā vai zinātniskā darbā;  14. spēj prasmīgi analizēt iegūtos rezultātus, patstāvīgi pielietojot teorijas, koncepcijas un analītiskās spējas pētniecībā; novērtēt izvēlētās metodes priekšrocības un trūkumus salīdzinājumā ar citām aprakstītām vai iespējamām metodēm;  15. spēj patstāvīgi strādāt ar zinātnisko literatūru spektroskopijas jomā, analizēt un interpretēt literatūru par vielu spektrāliem raksturlielumiem. | |
| Studējošo patstāvīgo darbu organizācijas un uzdevumu raksturojums | |
| Studējošo darbs tiek organizēts individuāli un grupās, patstāvīgi sagatavojoties semināriem un atbildot uz jautājumiem semināros atbilstoši tēmai.  Pirms katras nodarbības studējošie iepazīstas ar nodarbības tematu un atbilstošo zinātnisko un mācību literatūru. Patstāvīgais darbs paredzēts pēc katra semināra un ir saistīts ar apskatītas tēmas padziļinātu analīzi. Patstāvīgā darba ietvaros tiek veikta literatūras avotu analīze. Studējošie patstāvīgā darba ietvaros gatavojas kursa starppārbaudījumiem (2 kontroldarbi) un noslēguma pārbaudījumam.  1. kontroldarbs. Infrasarkano spektru interpretācija.  2. kontroldarbs. 1H un 13C KMR spektru interpretācija. | |
| Prasības kredītpunktu iegūšanai | |
| STUDIJU REZULTĀTU VĒRTĒŠANAS KRITĒRIJI  Studiju kursa apguve tiek vērtēta, izmantojot 10 ballu skalu, saskaņā ar Latvijas Republikas normatīvajiem aktiem un atbilstoši "Nolikumam par studijām Daugavpils Universitātē" (apstiprināts DU Senāta sēdē 17.12.2018., protokols Nr. 15), vadoties pēc šādiem kritērijiem: iegūto zināšanu apjoms un kvalitāte, iegūtās prasmes un kompetence atbilstoši plānotajiem studiju rezultātiem.  Summatīvā zināšanu un kompetenču vērtēšana notiks kontroldarbos. Obligāti ir sekmīgi jāuzraksta visi kontroldarbi.  Ja studējošais neierodas uz pārbaudes darbu vai to sekmīgi nenokārto, atkārtoti pārbaudes darbu ir obligāti sekmīgi jānokārto. Lai studējošo pielaistu pie rakstiska eksāmena un izliktu sekmīgu gala vērtējumu, viņam ir jābūt sekmīgi uzrakstītiem visiem paredzētajiem pārbaudes darbiem.  Gala vērtējumu par studiju kursu nosaka vidējais vērtējums par kontroldarbiem semestra laikā (50%), un atbildes eksāmenā (50%). Studiju kursa noslēguma pārbaudījums - rakstisks eksāmens.  Pie eksāmena kārtošanas tiek pielaisti tikai tie studējošie, kas ir nokārtojuši divus kontroldarbus.  STUDIJU REZULTĀTU VĒRTĒŠANA   |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | | Pārbaudījumu veidi | Studiju rezultāti | | | | | | | | | | | | | | | | 1. | 2. | 3. | 4. | 5. | 6. | 7. | 8. | 9. | 10. | 11. | 12. | 13. | 14. | 15. | | 1. kontroldarbs | X | X | X |  |  |  |  |  | X |  |  |  |  |  |  | | 2. kontroldarbs |  | X |  | X | X |  |  | X | X |  | X |  |  | X | X | | Eksāmens | X | X | X | X | X | X | X | X | X | X | X | X | X | X | X | | |
| Kursa saturs | |
| L16, S16, Pd48  Lekcijas:  1. Mūsdienu spektroskopijas vispārīgs pārskats: no gamma starojuma līdz radioviļņiem. Molekulārā spektroskopijas principi. Molekulas elektroniskās, vibrācijas un rotācijas kustības. Spektru reģistrēšanas aparatūra. Mūsdienu spektroskopijas galvenie uzdevumi, metodes un attīstības virzieni. L2, Pd6  2. Vibrāciju spektroskopijas vispārīgie principi un pamatmetodes. Infrasarkanās spektroskopijas principi. Kvalitatīvā un kvantitatīvā analīze. Eksperimenta metodes un tehnika, praktiskie uzdevumi. L2, Pd2  3. Virstoni un salikti toņi. Vibrāciju pāreju izpausme infrasarkanā un Ramana spektroskopijā. Ramana spektroskopijas principi, loma un speciālie uzdevumi. L2, Pd6  4. Elektronu spektroskopija. Elektronisko pāreju vibrācijas struktūra - vibroniskie spektri. Luminiscences spektru saikne ar absorbcijas spektriem. Stoksa likums un Levšina spoguļsimetrijas noteikums, iekšējā konversija. Luminiscences kvantu iznākums. Vavilova likums. Luminiscences spektroskopijas galvenie uzdevumi, metodes un attīstības virzieni. L2, Pd2  5. Atomu kodolu magnētiskās īpašības. Magnētiski aktīvie kodoli: 1H, 13C, 19F, 29Si, 31P u.c. Kodolu spina moments un magnētiskais moments. Kodolu magnētiskās rezonanses parādība un noteikumi. KMR spektrometra principiālā shēma un darbības režīmi. L2, Pd2  6. 1H-KMR spektroskopija. Deiterētie šķīdinātāji. Spektra raksturlielumi: signālu ķīmiskā nobīde, signālu intensitāte, signālu multiplicitāte. Empīriskas likumsakarības aizvietotāju ietekmes prognozēšanai: alkāni, alkēni, arēni. L2, Pd2  7. Priekšstats par spinu mijiedarbības mehānismu. Signālu multiplicitāte. Spinu mijiedarbības konstante. 13C-KMR spektroskopija. 13C- 1H-spinu mijiedarbība, tās izmantošana oglekļa atoma hibridizācijas stāvokļa noteikšanai. Struktūras faktoru ietekme uz 13C-KMR signālu ķīmisko nobīdi. L2, Pd2  8. 1H, 13C-KMR izmantošana organisko savienojumu struktūranalīzē. Dažādu spektru veidu interpretācija. L2, Pd2  Semināri:  1. Vibrāciju spektroskopijas vispārīgie principi un pamatmetodes. Infrasarkanās spektroskopijas principi. Kvalitatīvā un kvantitatīvā analīze. Eksperimenta metodes un tehnika, praktiskie uzdevumi. S2, Pd4  2. Elektronu spektroskopija. Elektronisko pāreju vibrācijas struktūra. Luminiscences spektru saikne ar absorbcijas spektriem. S2, Pd4  3. Atomu kodolu magnētiskās īpašības. Magnētiski aktīvie kodoli: 1H, 13C, 19F, 29Si, 31P u.c. Kodolu spina moments un magnētiskais moments. S2, Pd4  4. 1H-KMR spektroskopija. Spektra raksturlielumi: signālu ķīmiskā nobīde, signālu intensitāte, signālu multiplicitāte. S2, Pd4  5. Spinu mijiedarbības konstante. S2, Pd4  6. Dažādu 1H, 13C-KMR un infrasarkanu spektru interpretācija. S6, Pd4 | |
| Obligāti izmantojamie informācijas avoti | |
| 1Atkins P.  Atkins' Physical chemistry - Eleventh edition. - Oxford, United Kingdom: Oxford University Press; New York, NY, 2018. - 908 p.  2. Larkin P. J.  Infrared and raman spectroscopy: principles and spectral interpretation. Amsterdam: Elsevier; Boston, 2011. | |
| Papildus informācijas avoti | |
| 1. Spectroscopic methods in food analysis / [edited by] Adriana S. Franca and Leo M.L. Nollet. - Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2018. - 649 p.  2. Smith, E.  Modern Raman spectroscopy: a practical approach / Ewen Smith, Geoffrey Dent. - Second edition. - Hoboken, NJ: Wiley, 2019. - 241 p.  3. Instrumental methods of analysis/ Hobart H.Willard,Lynne L.Merritt,John A.Dean,Frank A.Settle. - 7th ed. - Belmont : Wadsworth Publishing Company, 1988. - 895 p. | |
| Periodika un citi informācijas avoti | |
| 1. Journal of the American Chemical Society <https://pubs.acs.org/journal/jacsat> (ACS Publications)  2. Tetrahedron <https://www.sciencedirect.com/journal/tetrahedron> (ScienceDirect)  3. Tetrahedron Letters <https://www.sciencedirect.com/journal/tetrahedron-letters> (ScienceDirect)  4. Bioorganic Chemistry <https://www.sciencedirect.com/journal/bioorganic-chemistry> (ScienceDirect)  5. DU abonētās datubāzes ScienceDirect, Scopus | |
| Piezīmes | |
| Akadēmiskās maģistra studiju programmas “Ķīmija” studiju kurss. A daļa.  Kurss tiek docēts latviešu valodā. | |