

Informačný list predmetu

Akademický rok 2024/2025

Vysoká škola	Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave
Fakulta	FPV UCM
Kód predmetu	KCH/md250/21
Názov predmetu	atómová a molekulová spektroskopia
Rozsah	2P + 1S
Počet kreditov	6
Vyučujúci	doc. Ing. Jozef Sokol, CSc. (prednášajúci), prof. RNDr. Ján Titiš, PhD. (garant predmetu)

Podmienky na absolvovanie predmetu

Účasť na prednáškach a cvičeniach. V priebehu semestra budú 2 písomné previerky, každá za 25 bodov. Z každej musí študent získať minimálne 50 % bodov. Skúška bude mať písomnú a ústnu časť, celkovo za 50 bodov. Spolu môže študent získať 100 bodov.

Celkové hodnotenie predmetu:

A 1,0 výborne – vynikajúce výsledky len s minimálnymi chybami < 92-100 % >;

B 1,5 veľmi dobre – nadpriemerné výsledky s menšími chybami < 83-91 % >;

C 2,0 dobre – vcelku dobré, priemerné výsledky < 74-82 % >;

D 2,5 uspokojivo – dobré výsledky, ale vyskytujú sa významné chyby < 65-73 % >;

E 3,0 dostatočne – výsledky vyhovujú minimálnym kritériám < 56-64 % >;

FX* 4,0 nedostatočne – absolvovanie predmetu si vyžaduje vynaložiť ešte značné úsilie a množstvo práce zo strany študenta < 0-55 % >.

Priebežné hodnotenie

Účasť na prednáškach a cvičeniach. V priebehu semestra budú 2 písomné previerky, každá za 25 bodov. Z každej musí študent získať minimálne 50 % bodov. Skúška bude mať písomnú a ústnu časť, celkovo za 50 bodov. Spolu môže študent získať 100 bodov.

Záverečné hodnotenie

Celkové hodnotenie predmetu:

A 1,0 výborne – vynikajúce výsledky len s minimálnymi chybami < 92-100 % >;

B 1,5 veľmi dobre – nadpriemerné výsledky s menšími chybami < 83-91 % >;

C 2,0 dobre – vcelku dobré, priemerné výsledky < 74-82 % >;

D 2,5 uspokojivo – dobré výsledky, ale vyskytujú sa významné chyby < 65-73 % >;

E 3,0 dostatočne – výsledky vyhovujú minimálnym kritériám < 56-64 % >;

FX* 4,0 nedostatočne – absolvovanie predmetu si vyžaduje vynaložiť ešte značné úsilie a množstvo práce zo strany študenta < 0-55 % >.

Výsledky vzdelávania

Absolvovaním profilového predmetu študent získa:

- vedomosti v oblasti teoretických a experimentálnych základov spektrálnych metód, pričom

rozumie súvisu medzi štruktúrou a spektrálnymi vlastnosťami látok;

- vedomosti a kompetencie v oblasti merania, interpretovania nameraných spektier a využitia získaných poznatkov pri riešení štruktúry organických, anorganických a koordinačných zlúčenín.

Stručná osnova predmetu

1. Úvod, rozdelenie spektrálnych metód a základné pojmy.
2. Povaha elektromagnetického žiarenia, klasický opis, Maxwellove rovnice, polarizácia žiarenia, interakcie s látkou, kvantovo-mechanické aspekty.
3. Absopcia, emisia a rozptyl žiarenia, Einsteinove koeficienty, spontánna a stimulovaná emisia, šírka spektrálnych čiar, energetické hladiny v atómoch a molekulách.
4. Experimentálne základy spektrálnych metód, spektrálne prístroje, zdroje žiarenia, detektory.
5. Princípy atómovej spektroskopie, atómová absorpčná a emisná spektroskopia.
6. Rotačná spektroskopia.
7. Vibračná spektroskopia.
8. Ramanova a rezonančná Ramanova spektroskopia.
9. Elektrónová spektroskopia.
10. Röntgenová fluorescenčná spektroskopia.
11. NMR a hmotnostná spektrometria.
12. Elektrónová spinová rezonancia.
13. Určenie štruktúry neznámej zlúčeniny, vzťahy medzi spektrom a molekulovou štruktúrou, riešenie IČ a NMR spektier.

Odporúčaná literatúra

Viktor Milata a kol.: Aplikovaná molekulová spektroskopia , 2008, ISBN: 978-80-227-2960-4

Miertuš a kol.: Atómová a molekulová spektroskopia. ALFA, Bratislava, 1991.

Milata V.: Aplikovaná molekulová spektroskopia , 1. vyd., STU, Bratislava, 2008.

Kellner E, ed.: Analytical Chemistry, Wiley, VCH, Weinheim, 2003.

McHalle J.L.: Molecular spectroscopy, CRC Press, 2017.

Jazyk, ktorého znalosť je potrebná na absolvovanie predmetu

slovenský jazyk, anglický jazyk