Informačný list predmetu

Akademický rok 2026/2027

Vysoká škola	Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave
Fakulta	FPV UCM
Kód predmetu	KCH/dx201/21
Názov predmetu	pokročilé metódy molekulovej spektroskopie
Rozsah	2P + 2S
Počet kreditov	10
Vyučujúci	doc. Ing. Jozef Sokol, CSc. (prednášajúci)

Podmienky na absolvovanie predmetu

Vypracovanie a prezentovanie práce na zadanú tému, zodpovedanie na otázky preverujúce vedomosti týkajúce jednotlivých okruhov osnovy predmetu.

Výsledky vzdelávania

Absolvovaním predmetu študent získa:
- vedomosti v oblasti teoretických a experimentálnych základov spektrálnych metód;
- vedomosti o súvislostiach medzi štruktúrou a spektrálnymi vlastnosťami látok;
- praktické vedomosti v oblasti merania, interpretovania nameraných spektier a využitia získaných poznatkov pri riešení štruktúry organických, anorganických, organokovových a koordinačných zlúčenín;
- prehľad a vedomosti o moderných metódach kvantovej chémie, ktoré vie využiť na modelovanie spektrálnych vlastností molekúl.

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. Základné princípy kvantovej chémie a teoretické modelovanie spektrálnych vlastností.
6. Rotačná a vibračná spektroskopia.
7. Cirkulárny dichroizmus a magnetický cirkulárny dichroizmus.
8. Ramanova a rezonančná Ramanova spektroskopia.
9. Elektrónová spektroskopia.
10. Röntgenová fluorescenčná spektroskopia.
11. NMR a hmotnostná spektrometria.
12. Elektrónová spinová rezonancia.
13. Záverečné hodnotenie.

Odporúčaná literatúra

Viktor Milata, a kol. Aplikovaná molekulová spektroskopia - ISBN: 978-80-227-2960-4
M. Čakrt a kol.: Praktikum z analytickej chémie, ALFA, Bratislava, 1989.
J. Garaj, D. Bustin, Z.Hladký: Analytická chémia, SNTL/ALFA, Bratislava, 1987.
Miertuš a kol.: Atómová a molekulová spektroskopia. ALFA, Bratislava, 1991.
Kellner E, ed.: Analytical Chemistry, Wiley, VCH, Weinheim, 2003.
Mason, W.,R.: Magnetic Circular Dichroism Spectroscopy, Wiley, 2007.

Jazyk, ktorého znalosť je potrebná na absolvovanie predmetu

slovenský jazyk, anglický jazyk