



LIETUVOS SVEIKATOS MOKSLŲ UNIVERSITETAS

PATVIRTINTA
Kauno medicinos universiteto
Senato
2007 m. gruodžio 21 d.
Nutarimu Nr. 27-08-01-02

ATNAUJINTA
2024 m. rugėjo 30 d.

INSTRUMENTINIAI ANALIZĖS METODAI

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ PASIRENKAMOJO DALYKO PROGRAMA

Dalyko programos koordinatorius:

Analizinės ir toksikologinės chemijos katedra, prof.dr. Liudas Ivanauskas
padalinio pavadinimas, vadovo pareigos, pedagoginis vardas, mokslo laipsnis, vardas, pavardė parašas

Padaliniai, dalyvaujantys dalyko programoje:

Analizinės ir toksikologinės chemijos katedra, vedėjas prof. dr. Liudas Ivanauskas
padalinio pavadinimas, vadovo pareigos, pedagoginis vardas, mokslo laipsnis, vardas, pavardė parašas

Kaunas, 2024 m.

Dalyko programos duomenys

Mokslų sritis	Medicinos ir sveikatos mokslai
Mokslo kryptis (kodas)	Farmacija – M 003
Dalyko pavadinimas	Instrumentiniai analizės metodai
Programos apimtis	160 val. (6 ECTS kreditai)
Mokymosi metodai:	
Paskaitos	30 val.
Seminarai	30 val.
Praktikos darbai	20 val.
Savarankiškas darbas	78 val.
Žinių patikrinimas (egzaminas)	2 val.

Dalyko programos rengimo grupė

Eil. Nr.	Pedagoginis vardas, vardas, pavardė	Pareigos	Telefonas (darbo)	Elektroninio pašto adresas
1.	Prof., dr. Liudas Ivanauskas	Analizinės ir toksikologinės chemijos katedros vedėjas, profesorius	327245, 5607	liudas.ivanauskas@lsmuni.lt
2.	Lekt., dr. Laurynas Jarukas	Analizinės ir toksikologinės chemijos katedros docentė	327246, 5607	Laurynas.jarukas@lsmu.lt
3.	Doc., dr. Asta Kubiliénė	Analizinės ir toksikologinės chemijos katedros profesorius	327246, 5607	asta.kubiliene@lsmuni.lt
4	Lekt., dr. Justė Baranauskaitė-Ortasoz	Analizinės ir toksikologinės chemijos katedros profesorius	327246, 5607	Juste.baranauskaite@lsmu.lt
5	Lekt., dr. Kristina Zymonė	Analizinės ir toksikologinės chemijos katedros profesorius	327246, 5607	kristina.zymone@lsmu.lt

STUDIJŲ DALYKO PROGRAMOS APRĀSAS

1. Studijų dalyko programos poreikis

Šiuolaikiniame farmacijos moksle svarbią vietą užima biologiškai aktyvių junginių kokybinis ir kiekybinis įvertinimas. Norėdami sėkmingai dirbti vaistų technologijos, fitochemijos, farmakognozijos, vaistų chemijos, naujų veikliųjų medžiagų paieškos, farmakokinetikos ir toksikologijos bei cheminės toksikologijos srityse, doktorantai privalo gerai žinoti ir suprasti instrumentinės analizės metodus. Esminis šiuolaikinės analizės principas – taikyti veiksmingus, jautrius, atrankius ir validuotus metodus. Studijuojantieji magistrantūroje studentai igyja analizės žinių, tačiau jos nėra pakankamai plačios, norint patiemis sėkmingai parinkti ir atliliki analitinius tyrimus. Papildomos ir platesnės šios farmacijos srities žinios yra būtinės norintiems sėkmingai

atliliki įvairius mokslinius tyrimus, susijusius su cheminių medžiagų analize.

2. Studijų dalyko programos tikslai

Pagrindinis studijų programos tikslas – pagilinti doktorantų žinias apie šiuolaikinius svarbiausius instrumentinės analizės metodus ir išmokyti šiuos metodus tikslingai pasirinkti ir naudoti moksliniuose tyrimuose sprendžiant mokslo daktarų disertacijų uždavinius.

Programos uždaviniai:

1. Pagilinti teorines žinias apie šiuolaikinius instrumentinės analizės metodus.
2. Gebeti planuoti mokslinius tyrimus ir eksperimentus, pritaikant tinkamiausius instrumentinės analizės metodus.
3. Pagilinti savo praktinius gebėjimus cheminės analizės srityje, dirbant su šiuolaikiniai svarbiausiais instrumentinės analizės prietaisais.
4. Išmokti apdoroti tyrimų metu gautus analitinius parametrus ir ivertinti analizės rezultatus.

3. Studijų dalyko programos sandara, turinys ir studijų metodai

Studijų dalyko programos sandara

Programos apimtis – 160 val.

Teorinė dalis	Paskaitos – 30 val.	Apimtis 18,75%
Teorinė-praktinė dalis	Seminarai – 30 val.	Apimtis 18,75%
	Praktikos darbai – 20 val.	Apimtis 12,5%
Individualus savarankiškas darbas	78 val.	Apimtis 48,75%
Pasiruošimas seminarams		
Pasiruošimas praktikos darbams		
Praktikos darbų rezultatų analizė, apibendrinimas		
Literatūros paieška duomenų bazėse ir jos nagrinėjimas		
Pasiruošimas baigiamajam žinių patikrinimui		
Žinių patikrinimas (egzaminas)	2 val.	Apimtis 1,25%
Iš viso:	160 val.	100%

Studijų dalyko programos turinys

Studijų programos turinys apima kelis pagrindinius teminius blokus apie instrumentinės analizės metodus pagal analitinius parametrus, tą parametru matavimo principus. Programos turinys pristatomi instrumentinės analizės metodų ypatumai, priklausomi nuo analizės metodų naudojimo skirtose žmogaus veiklos sferose, aptariamas instrumentinės analizės metodų panaudojimas biologiniuose tyrimuose, augalų fitocheminėje analizėje, vaistų kokybės kontrolėje, jų gamybos ir platinimo procesuose, greitojoje nuodų cheminėje paieškoje ūminių apsinuodijimų atvejais bei cheminėje toksikologinėje analizėje.

Studijų dalyko programos teoriniai blokai:

- ◆ chromatografinės analizės metodai;
- ◆ elektromagnetinės spinduliuotės matavimais pagrįsti instrumentinės analizės metodai;
- ◆ elektrocheminės analizės metodai;
- ◆ analitinių bandinių paruošimas instrumentinėje analizėje;
- ◆ instrumentinės analizės metodų pritaikymo sritys ir galimybės.

Dalyko programos studijų metodai

Dalyko studijų programa pateikiamą paskaitose, per seminarus-diskusijas, individualius laboratorinius darbus ir jų metu gautų duomenų analizę, gautų rezultatų matematinį statistinį įvertinimą. Praktinė studijų dalyko programos dalis įsisavinama individualiai dirbant su analitine aparatūra, kai doktorantai ne tik susipažins su analitinės aparatūros struktūra, principinėmis schemomis, analitinių parametru matavimu, bet ir išmoks bei įgis reikalingus analitiko-operatoriaus gebėjimus.

Studijų dalyko programa taip pat bus plačiau įsisavinama savarankiškai studijuojant pagrindinę ir papildomą literatūrą, per duomenų bazes gaunamą reikalingą informaciją bei ruošiantis išstudijuotos medžiagos įvertinimui per egzaminą.

TEORINĖ DALIS

Eil. Nr.	Paskaitos pavadinimas	Trukmė	Dėstytojas
1.	Plonasluoksnės chromatografijos metodo taikymo naujausi pasiekimai. Sorbentai, tirpikliai, ryškikliai, naudojami plonasluoksnėje chromatografijoje, naujausi gautų duomenų apdorojimo ir saugojimo būdai.	2 val.	Prof. L. Ivanauskas
2.	Dujų chromatografijos taikymo tinkamumas, kasdieninio taikymo ir konkrečių mēginių problematika ir sprendimai. Nauji sorbentai, taikomi skysčių chromatografijoje. Šiuolaikinės identifikavimo ir kiekybinio nustatymo metodikos dujų ir dujų-skysčių chromatografijos metodais.	4 val.	Prof. L. Ivanauskas
3.	ESC ir UESC metodikų taikymo tinkamumas, kasdieninio taikymo ir konkrečių mēginių problematika ir sprendimai. Naujausios detektorių rūšys, naudojamos SC, ESC ir jonų mainų chromatografijoje.	4 val.	Lekt., dr. Justė Baranauskaitė-Ortasoz
4.	Mēginių paruošimas analizei. Kietafazė ekstrakcija. Kietafazė mikroekstrakcija. Skysčių – skysčių ekstrakcija, jos naudojimas analizėje.	2 val.	Doc.Asta Kubiliénė
5.	Analitinės metodikos optimizavimo ir validacijos problemos. Metodikos pagrindinių charakteristikų parinkimo principai ir problemos. Validacijos kriterijų pašalinimas ir kitimas priklausomai nuo analizės metodų.	2 val.	Doc.Asta Kubiliénė
6.	ESC analitinės metodikos vystymas, optimizavimas ir validacija. Pagrindiniai skirstymo parametrai ir jų įtaka kolonėlės ir sorbento parinkimui.	2 val.	Doc.Asta Kubiliénė
7.	Kapiliarinės elektroforezės metodo vystymas. Elektroforegramos. Elektrokinetine chromatografija.	3 val.	Lekt., dr. Kristina Zymonė
8.	Liepsnos fotometrija.	3 val.	Lekt., dr. Justė Baranauskaitė-Ortasoz

	Atominė absorbcinė spektrinė analizė. Atominė fluorescencinė spektrinė analizė. Šiuo analizės metodų taikymo galimybės cheminėje analizėje.		
9.	Molekulinė absorbcinė spektrinė analizė. UV-, regimojo spektro ir IR-spektro molekulinė absorbcinė spektrinė analizė ir jos taikymo galimybės biologiškai aktyvių junginių moksliniuose tyrimuose.	2 val.	Lekt., dr. Laurynas Jarukas
10.	Šviesos sugerties ir išspinduliavimo spektrų duomenų įvertinimas, sprendžiant sudėtingus medžiagų analizės klausimus. Šiuolaikinė nefelometrinė ir turbidimetrinė analizė ir jos taikymo galimybės.	3 val.	Lekt., dr. Laurynas Jarukas
11.	Elektrocheminių analizės metodų perspektyvos atliekant bioaktyvių komponentų įvertinimą. Konduktometrinis ir aukštadažnis titravimas. Tiesioginė potenciometrija ir potenciometrinis titravimas.	3 val.	Lekt., dr. Kristina Zymonė
VISO:		30 val.	

TEORINĖ-PRAKTINĖ DALIS

Eil. Nr.	Seminaro temos pavadinimas	Trukmė	Dėstytojas
1.	Atominės ir molekulinės spektrinės analizės metoduose naudojama aparatūra. Šiuolaikinių fotoelektrokolorimetru, UV- ir IR-spektrofotometru, magnetinio lauko spektrometru, masių spektrometru schemas. Elektromagnetinės spinduliuotės matavimas ir spektrų užrašymas.	4 val.	Lekt., dr. Laurynas Jarukas
2.	Kokybinė ir kiekybinė spektroskopinė analizė. Spektrų užrašymas ir įvertinimas. UV, IR ir masių spektrų nagrinėjimas.	5 val.	Lekt., dr. Laurynas Jarukas
3.	Priemonės ir įranga, reikalinga plonasluoksnėje chromatografijoje. Dujų-skysčių ir skysčių chromatografai. Sorbentai, fazės. Detektoriai. Chromatografiniai parametrai.	4 val.	Prof. L. Ivanauskas
4.	Chromatogramų užrašymas, chromatografinių parametrų matavimas, įvertinimas ir jų panaudojimas medžiagų kokybinėje ir kiekybinėje analizeje dujų ir dujų-skysčių chromatografijos metodais.	5 val.	Prof. L. Ivanauskas
5.	Chromatogramų užrašymas, chromatografinių parametrų matavimas, įvertinimas ir jų panaudojimas medžiagų kokybinėje ir kiekybinėje analizeje efektyviosios skysčių chromatografijos metodu.	4 val.	Doc.Asta Kubiliénė
6.	Naujausi pasiekimai, taikant šiuolaikinius	4 val.	Lekt., dr. Justė Baranauskaitė-Ortasoz

	konduktometrinj ir potenciometrinj analizës metodus, jvertinant biologiškai aktyvius komponentus, gautų duomenų panaudojimo ir saugojimo būdai.		
7.	Naujausi pasiekimai taikant poliarografijos ir kulanometrinës analizës metodus, jvertinant biologiškai aktyvius komponentus. Gautų analitinių duomenų apdorojimo ir saugojimo būdai.	4 val.	Lekt., dr. Justė Baranauskaitė-Ortasoz
VISO:		30 val.	

PRAKTIKOS DARBAI EKSPERIMENTINĖ DALIS

Eil. Nr.	Eksperimentinio darbo pavadinimas	Trukmë	Dėstytojas
1.	Organinių junginių UV-spektrų užrašymas. UV-spektrų panaudojimas greitojoje nustatomu medžiagų cheminėje paieškoje. Atskirų organinių junginių kiekybinis nustatymas fotoelektrokolorimetrijos ir UV spektrofotometrijos metodais.	5 val.	Lekt., dr. Kristina Zymonė
2.	Rūgštaus, neutralaus ir bazinio pobūdžio medžiagų identifikavimas ir mišinio skirstymas, naudojant plonasluoksnę chromatografiją.	5 val.	Lekt., dr. Kristina Zymonė
3.	Biologiškai aktyvių junginių identifikavimas, atskyrimas ir kiekybinis nustatymas dujų-skysčių chromatografijos metodu. Biologiškai aktyvių junginių kiekybinio nustatymo duomenų jvertinimas matematinës statistikos metodu.	5 val.	Lekt., dr. Laurynas Jarukas
4.	Cheminių junginių sudėties bei jų kokybinis bei kiekybinis nustatymas vaistinėje žaliavoje efektyviosios skysčių chromatografijos metodu.	5 val.	Lekt., dr. Laurynas Jarukas
	VISO:	20 val.	

SAVARANKIŠKAS DARBAS

Trukmë 78 val.

Doktorantai savarankiškai ruošiasi seminarams, praktiniams eksperimentiniams darbams ir baigiamajam žinių patikrinimui. Tuo tikslu jie savarankiškai studijuoja pagrindinę ir papildomą rekomenduojamą literatūrą, mokslinius straipsnius bei kitą medžiagą iš duomenų bazių, kurią nurodo dėstytojai paskaitų, seminarų ir praktinių užsiėmimų metu.

Pagrindinė literatūra

Eil. Nr.	Leidinio pavadinimas	Leidinio autorius	Leidimo metai ir leidykla
1.	Cheminės analizės metodai. 1 dalis	Mickevičius D.	1998. "Žiburio leidykla".
2.	Cheminės analizės metodai. 2 dalis	Mickevičius D.	1999. "Žiburio leidykla".
3.	Efektyviosios skysčių chromatografijos pagrindai.	Maruška A., Kornyšova O., Machtejevas E.	VDU leidykla, Kaunas, 2005.
4.	Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications 2 nd ed.	Bard A.J.	2000. Wiley, John & Sons, Incorporated
5.			
6.	Foundations of Spectroscopy.	D.Simon, B.Gilbert	2000. Oxford University Press
7.	Fundaments of analytical chemistry	Skoog D.A.	2000, Saunders College Publishing
8.	Interpreting Infrared, Raman, and Nuclear Magnetic Resonance Spectra	Nyquist R.A.	Academic Press, 2001
9.	IR Spectroscopy: An Introduction	Gunzler H., Gunzler H.	1999. Wiley, John & Sons, Incorporated Pub.
10.	Mass Spectrometry Basics	Herbert C.G.	2002. CRC Press Pub.
11.	Mass Spectrometry: Principles and Applications.	V.Stroobant	2001. Wiley, John & Sons, Incorporated Pub.
12.	Preparativnaja židkostnaja chromatografija.	Vidlingmejer B.	Mir, Maskva, 1990.
13.	Principles of Instrumental Analysis	Douglas A.Skoog	2002. Books/College Pub.
14.	Rukovodstvo k praktičeskim rabotam po gazovoj chromatografii.	Stoliarov B.V. ir kt.	Chimija, Leningrad, 1988.
15.	Spectrophotometry, Luminescence and Colour: Science and Compliance	Ridge N.H.	Elsevier Science. 1995.
16.	Spin Dynamics: Basic Principles of NMR Spectroscopy	Levitt Malcolm H.	Wiley, John & Sons, Incorporated, 2001.
17.	The Essence of Chromatography.	Poole C.F.	Elsevier. Amsterdam, Boston, London, New York, Oxford, Paris, San Diego, San Francisko, Singapore, Sydney, Tokyo, 2003.
18.			
19.	Thin-Layer Chromatography	F.Bernard, J.Sherma	1999. Marcel Dekker Pub.
20.	Undergraduate instrumental Analysis. Ed. 6.	Robinson J.W.	2005.
21.	UV-VIS Spectroscopy and Its Applications	Perkampus Heinz-Helmut	Springer-Verlag New York, Incorporated Pub. 1994.

Papildoma literatūra

Eil. Nr.	Leidinio pavadinimas	Leidinio autorius	Leidimo metai ir leidykla
1.	A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy	Macomber Roger S.	Wiley, John & Sons, 1997
2.	Chromatography and Separation Science.	Ahuja S.	Academic Press. Amsterdam, Boston, London, New York, Oxford, Paris, San Diego, San Francisko, Singapore, Sydney, Tokyo, 2003.
3.	Chromatography. Second Edition.	Miller J.M.	Wiley-Interscience, 2005.
4.	Clarke's Analysis of Drugs and Poisons. Vol 1 and 2	Moffat A.C., Osselton M.D., Widdop B.	The pharmaceutical Press, London, 2004.
5.	Gas-Liquid Solid Chromatography	Berezkin V.G.	1990. Marcel Dekker Pub.
6.	Handbook of Drug Analysis.	Liu R.H., Gadzala D.E.	1997.
7.	Clarke's Analytical Forensic Toxicology	Sue Jickellls, Adam Negrusz	London, Pharm. Press, 2008.
8.	Immunoassays: A Practical Approach (Practical Approach Series)	Gosling J.P.	(Oxford University Press(UK), 2002.
9.	Interpretation of Mass Spectra 4 th ed.	McLafferty Fred W.W.	University Science Books Pub. 1996
10.	Molecular Spectroscopy Workbench: Advances, Applications, and Practical Advice on Modern Spectroscopic Analysis	Ciurczak E.W.	1998. Wiley, John & Sons, Incorporated Pub.
11.	Nuodingųjų medžiagų išskyrimas ir nustatymas atliekant teismo chemijos ekspertizes.	Vainauskas P., Kazlauskienė D.	KMU spaudos ir leidybos centro leidykla, Kaunas, 2002.
12.	Physical Chemistry: A Molecular Approach	McQuarrie Donald A.	University Science Books, 1997
13.	Practical HPLC Method Development	Snyder Lloyd R.	Wiley-Interscience, 1997
14.	Primer of Biostatistics	Stanton A.Glantz	Hill, Inc, 1994
15.	Principles of instrumental Analysis. Ed. 5.	Skoog D.A.	1998.
16.	Static Headspace – Gas Chromatography, Theory and Practice.	Kolb B., Ettre L.S.	1997.

Priedas Nr. 2

4. Numatomų dėstytojų sąrašas:

1. Studijų dalyko programoje dėstysiantys profesoriai:
Prof. dr. Liudas Ivanauskas
2. Studijų dalyko programoje dėstysiantys docentai:

Doc.dr. Asta Kubilienė

3. Studijų dalyko programoje dėstysiantys lektoriai:

Lekt., dr. Laurynas Jarukas

Lekt., dr. Kristina

Zymonė

Lekt., dr. Justė

Baranauskaitė-Ortasoz

Studijuojamo dalyko įvertinimas

Suminis balas: 100% balo sudaro:

40% - aktyvumas ir pasiruošimas paskaitose, seminaruose ir praktikos darbuose;

30% - savarankiškas darbas;

30% - baigiamasis teorinis patikrinimas (egzaminas).