

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslų kryptis (šaka) kodas	Fakultetas Institutas	Katedra Skyrius
Chromatografija	Chemija 03P	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Analizinės ir aplinkos chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
paskaitos		konsultacijos	3
individualus	7,5	seminarai	

Dalyko anotacija

Chromatografijos vystymosi istorija. Chromatografijos procesai. Chromatografinio atskyrimo principai ir metodai. Chromatografinio proceso teoriniai pagrindai. Tarpmolekulinės sąveikos chromatografijoje. Analitės pasiskirstymo tarp fazių koeficientas ir jos sulaikymas, pagrindinės sulaikymo charakteristikos. Efektyvumas, skiriamoji geba ir atrankumas, jų tarpusavio sąryšis. Efektyvumo didinimo būdai. Smalių asimetriškumas, jį sukeliančios priežastys. Kinetiniai procesai chromatografijoje, van Deemterio lygtis, sukurinė difuzija, molekulinė difuzija, pasipriešinimas masių mainams tarp fazių, zonų išsiplėtimas ne kolonėlėje, kolonėlės perkrovos efektai.

Dujų chromatografija. Dujų chromatografijos rūšys. Kolonėlės su užpildu: skystos nejudrios fazės, skystos fazės nešikliai, modifikuoti sorbentai, kolonėlės parametrai. Kapiliarinės kolonėlės: klasifikacija, kolonėlės medžiaga, paruošimas, darbo su kapiliarinėmis kolonėlėmis specifika. Dujų chromatografijos aparatūra: mėginio įleidimo sistemos, detektoriai.

Skysčių chromatografija. Klasikinė ir efektyvioji skysčių chromatografija. Bendri principai. Efektyviosios skysčių chromatografijos aparatūra. Siurbliai. Mėginio įleidimo sistemos. Kolonėlės. Detektoriai: spektrofotometrinis, refraktometrinis, garinantysis šviesos sklaidos, elektrocheminiai detektoriai.

Bendros sorbentų charakteristikos: dalelių dydis ir forma, savitasis paviršius, porėtumas. Neorganiniai sorbentai. Organiniai polimeriniai sorbentai. Hibridiniai sorbentai. Chemiškai modifikuoti sorbentai: ligandų prijungimo būdai, ligandų tipai, problemos. Monolitiniai sorbentai, jonitai, chiraliniai sorbentai, molekulinį atspaudų sorbentai.

Bendri reikalavimai tirpikliams skysčių chromatografijoje. Tirpiklių klasifikavimas. Tirpiklio parinkimas, izokratinis ir gradientinis eliuacijos režimai, jų privalumai ir trūkumai.

Efektyviosios skysčių chromatografijos variantai. Normalių ir atvirkščių fazių adsorbcinė chromatografija. Hidrofilinės sąveikos chromatografija. Jonų atskyrimas: jonų mainų chromatografija, kompensacinė jonų chromatografija, jonų porų chromatografija. Dydžio išskyrimo chromatografija. Biospecifinė chromatografija.

Skysčių chromatografijos vystymosi tendencijos: ultraefektyvioji skysčių chromatografija, aukštatemperatūre skysčių chromatografija, daugiadimensinė skysčių chromatografija, skysčių chromatografijos miniatiūrizacija.

Chromatografijos apjungimas su masių spektrometrija, bendri principai, jonų šaltiniai, masių analizatoriai, tandeminė masių spektrometrija.

Mėginių paruošimas chromatografiniai analizei. Analizių išskyrimas, koncentravimas, derivatizacija.

Chromatografijos praktiniai aspektai. Kolonėlės parinkimas ir testavimas. Judrios fazės parinkimas, atskyrimo sąlygų optimizavimas. Analizių identifikavimas, kiekybinė analizė, chromatografinės analizės paklaidų šaltiniai. Chromatografijos taikymas.

Pagrindinė literatūra

1. R.L. Grob, E.F. Barry. Modern Practice of Gas Chromatography. John Wiley & Sons, Ltd., 2004.
2. V.R. Meyer. Practical High-Performance Liquid Chromatography. John Wiley & Sons, Ltd., 2010.
3. A. Maruška, O. Kornyšova, E. Machtejevas. Efektyviosios skysčių chromatografijos pagrindai. VDU leidykla, 2005.
4. L.R. Snyder, J.J. Kirkland, J.W. Dolan. Introduction to Modern Liquid Chromatography. John Wiley & Sons, Ltd., 2010.
5. R. E. Ardrey. Liquid Chromatography-Mass Spectrometry: an Introduction. John Wiley & Sons, Ltd., 2003.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Audrius Padarauskas	Habil. dr.	Prof.	Central European Journal of Chemistry, 10(3) (2012) 652-674. Journal of Separation Science, 36 (2013) 1437-1445. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 62 (2014) 11099-11108. Acta Chromatographica, 27 (2015) 373-385.
Vida Vičkačkaitė	Dr.	Prof.	Acta Chromatographica, 24 (2012) 589-601. Central European Journal of Chemistry, 10(3) (2012) 652-674. Journal of Separation Science, 37 (2014) 1989-1995.

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

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva.