

Dalyko sando aprašasStudijų programa – **Bioinformatika**
nuo 2009/2010 mokslo metų

Dalyko sando kodas (<i>Course unit code</i>)	BFCH2112
Dalyko sando pavadinimas (<i>Course unit title</i>)	Fizikinė chemija
Dėstytojo (-jų) pedagoginis vardas, vardas ir pavardė (<i>Name and title of lecturer</i>)	Dr. Justas Barauskas
Katedra, centras	Biochemijos institutas
Fakultetas, padalinys	
Dalyko sando lygis (<i>Level of course</i>)	Pirmosios pakopos
Semestras (<i>Semester</i>)	Rudens (3)
ECTS kreditai (<i>ECTS credits</i>)	4,5
VU kreditai (<i>VU credits</i>)	3
Auditorinės valandos	Viso dalyko 48 val. Paskaitų 32 Pratybų 16
Reikalavimai (<i>Prerequisites</i>)	Matematinė analizė: diferencialinio ir integralinio skaičiavimo pagrindai. Tiesinės algebros ir geometrijos pagrindai.
Dėstomoji kalba (<i>Language of instruction</i>)	Lietuvių (gali būti anglų)
Dalyko sando tikslai ir numatomi gebėjimai (<i>Objectives and learning outcomes</i>)	1. Įgyti pagrindines bendrojo pobūdžio žinias apie cheminių medžiagų molekulinę sandarą ir instrumentinius tyrimo metodus. 2. Įgyti cheminės termodinamikos pagrindus. Susipažinti su šiuolaikinės cheminės ir fermentinės kinetikos pagrindais.
Dalyko sando turinys (<i>Course unit content</i>)	Atomų ir molekulių struktūra. Simetrija. Kvantinės teorijos pagrindai. Elektroninė spektroskopija. Virpesių spektroskopija. Rezonansiniai tyrimo metodai. Masių spektroskopija. Kristalai ir jų struktūra. Rentgenostruktūrinės analizės metodai. Elektrinės ir magnetinės medžiagų savybės. Tarpmolekulinės jėgos. Savitvarkiai nanodariniai ir mikroskopiniai medžiagų tyrimo metodai: STM, AFM ir elektroninė mikroskopija. Termodinamikos dėsniai: pagrindinės termodinaminės funkcijos, procesų savaiminio vyksmo krypties kriterijai. Statistinės termodinamikos elementai. Biologinių procesų energetika. Makromolekulių konformacinių virsmų termodinamika. Cheminė pusiausvyra, pusiausvyros, rūgščių ir bazių disocijacijos konstantos, elektrolitų disocijacijos teorijos pagrindai. Adsorbciniai procesai.

	Cheminių procesų greičiai. Empiriniai kinetiniai dėsniai. Fermentinės kinetikos pagrindai. Dinaminės molekulinės kinetikos pagrindai: molekulių dūžių ir aktyvuoto komplekso teorijos, šiuolaikinė elektrono pernašos teorija.
Pagrindinės literatūros sąrašas (Reading list)	<ol style="list-style-type: none"> 1. P.W Atkins. Physical chemistry. Oxford university press. (anglų k., 5,6, 7 arba 8 leidimai). 2. P. Atkins, J. de Paula. Elements of Physical Chemistry., Oxford University Press. 2009 (anglų k.). 3. G. G. Hammes. Thermodynamics and kinetics for the biological sciences. Wiley-Interscience. (anglų k.).
Papildomos literatūros sąrašas	<ol style="list-style-type: none"> 1. K.A.Rubinson and J.F.Rubinson. Contemporary Instrumental Analysis. Prentice Hall; 1st ed., 2000. (anglų k.). 2. D. Evans and H. Wennerström. The Colloidal Domain: Where Physics, Chemistry, Biology, and Technology Meet., Wiley-VCH, New York, 1999 (anglų k.). 3. V.Daujotis. Kvantinės chemijos įvadas. VU leidykla. 2000. (lietuvių k.). 4. J. N. Israelachvili. Intermolecular and Surface Forces., Academic Press, London, 1991 (anglų k.).
Mokymo metodai (Teaching methods)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Paskaitos - pagrindinė kurso medžiaga išdėstoma paskaitų metu, kurių metu panaudojamos skaidrės ir kompiuterinė grafinė medžiaga. 2. Pratybos – pratybų metu studentai nagrinėja pratimus susijusius su teorine kurso medžiaga, savarankiškai sprendžia dėstytojo parengtas užduotis. 3. Savarankiškas darbas – semestro metu dėstytojas nurodo atskirus skyrius iš pagrindinės bei papildomos literatūros sąrašo, kuriuos studentai privalo perskaityti.
Lankomumo reikalavimai (Attendance requirements)	Būtina lankyti ne mažiau 80% pratybų.
Atsiskaitymo reikalavimai (Assessment requirements)	2 tarpiniai atsiskaitymai, apimantys pratybose nagrinėtas užduotis. Egzaminą sudaro iki 30 klausimų testas, apimantis paskaitų metu išdėstytą kurso medžiagą.
Vertinimo būdas (Assessment methods)	Egzamino rezultatas vertinamas 10-bale sistema. Galutinį rezultatą sudaro: 3 balai (1.5 + 1.5) už tarpinius pratybų užduočių atsiskaitymus ir 7 balai už paskaitų ir savarankiško darbo testą. Laikomasi nuostatos, kad minimalus patenkinamas pažymys yra rašomas tada, kai studentas teisingai atsako į 50 ir daugiau procentų pratybų užduočių ir testo klausimų.
Aprobuota katedros	2009
Patvirtinta Studijų programos komiteto	2009