

## Obor Fyzikální chemie

Státní závěrečná zkouška sestává z tří povinných předmětů, které jsou koncipovány na základě znalostí získaných v povinných předmětech studijního oboru Fyzikální chemie:

- Struktura molekul a fyzikálně chemické metody jejich studia
- Statistická termodynamika a termodynamika nerovnovážných procesů
- Kinetika chemických procesů

Zkouška klade důraz na důkladné porozumění souvislostem a poznatkům získaným absolvováním povinných a povinně volitelných kurzů magisterského studia, přihlédnuto je ke specializaci kandidáta, dané zaměřením jeho diplomové práce. Rámcové okruhy témat ke státní závěrečné zkoušce jsou uvedeny níže. Součástí státní závěrečné zkoušky je též obhajoba diplomové práce, při níž má uchazeč prokázat schopnost prezentovat získané výsledky a orientovat se v problematice specializované oblasti i širší disciplíny na současné odborné úrovni. Obhajoba diplomové práce má formu ústní prezentace, během níž uchazeč seznámí komisi a posluchače s tématem a cíli práce, řešenými problémy, použitými metodami a získanými výsledky. Odpovídá na připomínky a dotazy obsažené v posudcích vedoucího a oponenta práce a reaguje na dotazy vznesené v průběhu diskuse.

## Okruhy otázek:

### 1. Struktura molekul a fyzikálně chemické metody jejich studia

#### *Kvantově chemické metody popisu elektronové struktury molekul*

Základní pojmy kvantové mechaniky. Atom vodíku. Atomy s více elektrony. Molekula  $H_2^+$ . Metoda MO-LCAO. Jednoduchá Hückelova metoda a struktura planárních uhlovodíků. Symetrie molekul. Elektronová struktura malých molekul: molekuly  $H_2^+$ ,  $A_2$ , AB,  $AH_2$ ,  $AH_3$ ,  $AH_4$ .

#### *Základní spektroskopické metody pro studium struktury molekul*

Metody založené na absorpci elektronů a gama záření (hmotnostní spektroskopie a Moessbauerova spektroskopie). Metody založené na difrakci elektronů, neutronů a roentgenova záření (difrakční metody). Metody založené na absorpci roentgenova a ultrafialového záření a na absorpci elektronů (fotoelektronová a Augerova spektroskopie, roentgenová fluorescenční analýza). Metody založené na absorpci ultrafialového a viditelného záření (elektronová spektroskopie). Metody založené na absorpci infračerveného a mikrovlnného záření (spektra rotační, vibrační a rotačně-vibrační). Molekuly v elektrickém poli světelné vlny (Rayleighův a Ramanův rozptyl, Ramanova spektroskopie). Molekuly v elektrickém poli (permitivita dielektrika, polarizovatelnost, indukovaná a orientační polarizace, indukovaný a permanentní elektrický dipólový moment, mezimolekulární interakce, dielektrická ztráta a dielektrická relaxace, adsorpce molekul na nabitém fázovém rozhraní, komplexy s přenosem náboje, protonu nebo iontu, optické jevy vyvolané interakcí molekul s elektromagnetickým zářením). Přechod světla látkami (lom světla, refrakce). Molekuly v magnetickém poli (magnetická indukce, magnetizace, permanentní magnetický dipólový moment, anizotropie magnetické susceptibility, diamagnetika, paramagnetika a ferromagnetika). Metody založené na absorpci mikrovlnného a radiofrekvenčního záření látkami v magnetickém poli (elektronová paramagnetická a nukleární magnetická rezonanční spektroskopie).

#### *Základní elektroanalytické metody pro studium struktury molekul a pro stanovení jejich fyzikálně chemických parametrů*

Rovnovážná elektrochemie (elektrochemický článek, potenciometrie a potenciometrická titrace, typy elektrod, iontově selektivní elektrody, Donnanův a Nernstův potenciál, měření pH, rovnovážné konstanty protonizace a komplexace). Dynamická elektrochemie (elektrolýza, redoxní vlastnosti analytu a jeho elektronová struktura, Marcusova teorie, elektroanalytické metody jako je elektrogravimetrie, coulometrie, polarografie, voltametrie, hydrodynamické metody, impedanční spektra. Konduktometrie a dielektrometrie. Elektrochemické senzory.

## 2. Statistická termodynamika a termodynamika nerovnovážných procesů

### *Statistická termodynamika*

Statistická termodynamika a molekulární stavba hmoty, postuláty statistické termodynamiky. Molekulární partiční funkce a její interpretace, výpočet populace stavu. Vnitřní energie a entropie ve statistické termodynamice, Boltzmannův vztah pro entropii. Kanonická partiční funkce a kanonické soubory. Chemické aplikace statistické termodynamiky, příspěvky k partiční funkci: translační, vibrační, rotační a elektronový. Střední hodnota energie, rotační a vibrační teplota, ekvipartiční princip. Statistické vyjádření chemické rovnováhy a výpočet rovnovážné konstanty reakce. Statistická termodynamika ideálních a reálných plynů, kapalin a krystalů. Fonony, vibrační a konfigurační entropie.

### *Termodynamika nerovnovážných procesů*

Základy termodynamiky nevratných procesů (produkce entropie, fenomenologické rovnice a Onsagerovy reciproční vztahy, evoluční kritéria a stabilita stacionárních stavů). Termodynamická analýza spřažených procesů (přeměna energie, osmóza a elektrokinetické jevy, termoelektrické jevy). Matematické modelování nelineárních dynamických systémů (základní pojmy, traktory, bifurkace, vznik prostorových struktur, oscilující Belousova a Žabotinského reakce, analýza řízení metabolismu, prebiotická evoluce).

## 3. Kinetika chemických procesů

Základní pojmy chemické kinetiky (rychlost reakce, rychlostní konstanta, řád reakce). Určení řádu reakce (metoda počátečních rychlostí, integrační, frakčních časů, izolační). Reakční mechanismus a rychlostní zákony (molekularita, elementární reakce). Následné, souběžné a zpětné reakce (ustálený stav, rychlost určující krok). Katalyzované reakce (homogenní, enzymatické, heterogenní). Řetězové reakce (polymerace, rozvětvený řetězec). Reakční termodynamika (Arrheniova rovnice, kolizní teorie a teorie přechodového stavu). Difúze v tuhé fázi. Elektroodová kinetika (heterogenní kinetické parametry, elektroodová dvojvrstva, transport látek z roztoku k povrchu elektrody, mechanismus elektroodového procesu, koroze).

### **Literatura:**

- Lowe, John P. a Peterson, Kirk A. Quantum chemistry. 3rd ed. Elsevier Academic Press, 2006. 728 s. ISBN 0-12-457551-X.
- Jean, Yves a Volatron, Francois. An Introduction to Molecular Orbitals. Oxford University Press, 1993. 337 s. ISBN 0-19-506918-8.
- Atkins, Peter W. Physical chemistry. 6th ed. Oxford: Oxford University Press, 1998. 1014 s. ISBN 0-19-850101-3.
- Atkins, Peter W. The elements of physical chemistry. Oxford: Oxford University Press, 1992. 496 s. ISBN 0-19-855723-X.

- Exner, Otto. Struktura a fyzikální vlastnosti organických sloučenin. 1. vyd. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1985. 275 s.
- Holba, Vladislav. Fyzikálně-chemické vlastnosti atomů a molekul. 1. vyd. Bratislava: Slovenské pedagogické nakladatel'stvo, 1980. 282 s.
- Zýka, Jaroslav. Analytická příručka. Díl I. 4. upr. vyd. Praha: SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 678 s.
- Čermáková, Ludmila a Zýka, Jaroslav. Analytická chemie méně běžných prvků. 1. vyd. Praha: Státní pedagogické nakladatelství, 1990. 176 s. ISBN 80-7066-050-3.
- Brett, Christopher M. A. a Brett, Ana M.O. Electroanalysis. Oxford: Oxford University Press, 1998. 96 s. ISBN 0-19-854816-8.
- Bard, Allen J. a Faulkner, Larry R. Electrochemical methods :fundamentals and applications. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 2001. xxi, 833 s. ISBN 0-471-04372-9.
- Klouda Pavel. Moderní analytické metody. 2. uprav. a dopl. vyd. Ostrava: Pavel Klouda, 2003. 132 s. ISBN 80-86369-07-2.
- Bard, Allen J., Stratman, M. Encyclopedia of Electrochemistry, Instrumentation and Electroanalytical Chemistry, Vol.3, Wiley-VCH,2001.
- Boublík, Tomáš. Statistická termodynamika. Vyd. 1. Praha: Academia, 1996. ISBN 80-200-0566-8.
- Fischer, Oldřich a Kučera, Igor. Nerovnovážné soustavy : termodynamika nevratných chemických a buněčných procesů. 1. vyd. Praha: Státní pedagogické nakladatelství, 1987. 154 s.
- Coveney, Peter V. a Highfield, Roger. Šíp času :cesta vědou za rozluštěním největší záhady lidstva. 1. vyd. Ostrava: Oldag, 1995. 472 s. ISBN 80-85954-08-7.
- Gleick, James. Chaos :vznik nové vědy. Translated by Jaroslav Sedlář - Renata Kamenická. 1. vyd. Brno: Ando Publishing, 1996. 349 s. ISBN 80-86047-04-0.
- Treindl, Ľudovít. Chemická kinetika. 2. přeprac. vyd. Bratislava: Slovenské pedagogické nakladateľstvo, 1990. 347 s. ISBN 80-08-00365-0.
- Masel, Richard I. Chemical kinetics and catalysis. New York: John Wiley & Sons, 2002. xiii, 952 s. ISBN 0-471-24197-0.