

Obor **Materiálová chemie**

Státní závěrečná zkouška sestává ze dvou povinných předmětů a jednoho předmětu volitelného ze tří možností. Náplň zkoušek je koncipována na základě teoretických znalostí a praktických zkušeností získaných v profilových předmětech studijního oboru Materiálová chemie.

Povinné předměty SZZ

- Syntéza, struktura a vlastnosti materiálů
- Kovové materiály

Volitelné předměty SZZ

- Fyzikální metody studia struktury a vlastností materiálů
- Nekovové materiály
- Teoretické metody studia struktury a vlastností materiálů

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. Uchazeč koná zkoušku ze dvou povinných předmětů SZZ a jednoho volitelného předmětu SZZ. 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:

Povinné předměty

1. Syntéza, struktura a vlastnosti materiálů

Základní typy přípravy anorganických materiálů. Redukční metody, spalovací metody, sol-gel metody, srážecí reakce, atd. Reakce v tuhém stavu a jejich kinetika. Mechanochemická syntéza. Syntéza za asistence mikrovlnného záření. Vysokotlaké metody syntézy, Detonační Reakce. Syntéza v plynné fázi a heterogenním prostředí (aerosolové metody). Syntéza z prekurzorů, reakce v taveninách a iontových solích, syntéza iontová. Hydrotermální syntéza. Sonochemická syntéza. Syntéza porézních materiálů. Zeolity. Vrstevnaté materiály. Růst monokrystalů.

Stavební hmoty a silikáty. Výroba maltovin, cementů, sádry, keramiky, porcelánu, skla, výroba technických materiálů na bázi elementárního křemíku a polovodičů. Složení, chemie, vlastnosti a zpracování přírodních surovin. Dřevo, celulóza, viskóza, papír, třísloviny, silice, glukóza, lignin. Příprava, vlastnosti a aplikace polovodičů. Základy polovodičové technologie (růst krystalů, zonální tavba, difuze p-n přechod). Syntéza a vlastnosti kompaktních, vláknitých materiálů, tenkých vrstev a nanostrukturovaných materiálů.

Vlastnosti krystalů. Přímá a reciproká mřížka, Bravaisovy mřížky, interference, radiální distribuční funkce. Povrchy pevných látek. Popis krystalografie povrchu, směrů a rovin. Uspořádání fází a jejich krystalová mřížka. Rovnovážná termodynamika chemických reakcí při přípravě materiálů. Termodynamické stavové funkce vícesložkových soustav. Rovnovážná konstanta reakce. Chemický potenciál a aktivita. Gibbsova energie reálné soustavy, dodatkové funkce. Fázové rovnováhy s kapalnou fází (destilace, extrakce, sublimace). Fázové diagramy vícesložkových soustav (koexistence tuhých fází, odstraňování nečistot). Příklady reálných fázových diagramů technických materiálů. Elektronová struktura pevných látek, chemická vazba, Pásová teorie.

Stereochemie anorganických, koordinačních a organokovových sloučenin. Symetrické vlastnosti molekul. Bodové a prostorové grupy symetrie. Isomerie koordinačních sloučenin. Chiralita. Struktura a vlastnostmi allotropů prvků hlavních podskupin, homopolyatomických kationtů a aniontů nekovů a chemií klecovitých molekul a klastrů vytvářených P-prvky. Teorie PSEPT. Koordinační chemie. Komplexotvorné rovnováhy, mechanismy tvorby komplexů ve vodné fázi a způsoby stanovení konstant stability. Praktické využití komplexotvorných reakcí.

Difúze. Základní pojmy. Atomární mechanismy difúze. Fickovy zákony. Okrajové podmínky difúze. Řešení základních difúzních problémů. Fázové transformace v kovech a jejich slitinách. Stabilní a metastabilní fázové rovnováhy, bezdifúzní a difúzní fázové přeměny, nukleace a růst. Fázové rovnováhy a difúzi řízené děje v chemické laboratoři a technologické praxi: hrubnutí a rozpouštění fází, homogemizace.

2. Kovové materiály

Základní typy krystalových mřížek kovů. Těsné uspořádání. Elektronová struktura kovů. Fyzikální vlastnosti kovových materiálů (el. a tepelná vodivost, difúze, optické vlastnosti). Optické, termické, korozní a chemické vlastnosti kovů a jejich slitin. Elektrické, magnetické a mechanické vlastnosti kovů a jejich slitin.

Vlastnosti kovů a slitin, strukturní defekty v kovech, jejich vliv na mechanické vlastnosti. Difúze a migrace poruch krystalové mříže (dislokace, vrstevné chyby, hranice zrn a fází). Metody studia mikrostruktury kovů a jejich slitin. Metody zkoušení kovů a jejich slitin (chemické, fyzikální, fyzikálně chemické, strukturní, mechanické). Pevnostní vlastnosti kovových materiálů (deformace, moduly pevnosti, zpevnění, houževnatost).

Elektrochemická příprava kovů a jejich slitin. Kovové kompozity. Nekrystalické kovové materiály (kovová skla). Intermetalika a stechiometrické sloučeniny ve slitinách. Termodynamický popis fází kovů a jejich slitin. Základní typy fázových diagramů kovů a jejich slitin. Krystalizace kovů a jejich slitin. Prášková metalurgie a její aplikace. Kompozitní materiály. Příprava, charakterizace, vlastnosti a použití nanočástic kovů a jejich slitin.

Základní typy železných slitin. Výroba slitin na bázi Fe-C. Fázové diagramy. Litina, ocel uhlíková a legovaná, třídy materiálů, ovlivňování struktury ocele tepelné zpracování, TTT diagramy ocelí. Povrchové úpravy materiálů na bázi Fe. Základní typy neželezných slitin a jejich výroba. Technologie přípravy kovových materiálů (krystalizace, kontinuální a diskontinuální technologie, tváření, odlévání, obrábění, povrchové úpravy). Lehké kovy a jejich slitiny (Al, Mg), nízkotavné kovy a jejich slitiny (Pb, Zn, Sn, pájky). Kovy a jejich slitiny se střední teplotou tání (Cu) a s vysokou teplotou tání (Ti). Technologie a vlastnosti významných kovů a jejich slitin (Ni, Pt, Zr, Mo, W, Co,...). Výroba uranu a technologie přepracování vyhořelého jaderného paliva. Svařování kovů. Pájení.

Volitelné předměty

1. Fyzikální metody studia struktury a vlastností materiálů

Optická mikroskopie (mikroskop, zobrazovací metody, polarizované světlo, diferenciální interferenční kontrast, fázový kontrast, barevná metalografie). Metody přípravy vzorků pro optickou mikroskopii (broušení, leštění, chemické úpravy, elektrochemické metody). Elektronová mikroskopie. Interakce elektronového svazku s materiálem. Mechanismy rozptylu (nepružný, pružný, emise elektronů ze vzorku, sekundární a odražené elektrony). Příprava vzorků.

SEM (REM). Schéma rastrovacího mikroskopu. Tvorba obrazu. Kontrast (chemický, topografický). Zobrazovací režimy, detektory signálů. Požadavky na vzorky, příprava vzorků. Využití SEM. TEM. Charakteristika, schéma, základní konstrukční prvky. Tvorba obrazu. Difrakční konstanta. Rozptylový a difrakční kontrast. Difrakční obrazce a jejich interpretace. Příprava vzorků pro TEM, využití. Mikroskopie rastrující sondy (SPM). Obecná charakteristika metod, rozdělení podle druhu interakce (STM, AFM, SNOM, MFM,...). Rastrovací tunelová mikroskopie (STM). Mikroskopie atomových sil (AFM), princip a využití.

Základy spektroskopických metod. Optická emisní spektroskopie (OES). OES s buzením v plazmatu (ICP, DCP). Elektronová mikroanalýza. Princip, detekce záření. Elektronová mikrosonda. Energiově disperzní analýza (EDA), vlnově disperzní analýza (WDA). Příprava vzorků, metody kvalitativní mikroanalýzy. Metody analýzy povrchu. Všeobecný princip. Augerovy elektronové spektroskopie (AES), SIMS, LEED, XPS, APS, RBS. Princip a využití. Specifika charakterizace nanočástic metodou DLS.

Strukturní rentgenografie. Vznik a vlastnosti rtg záření, interakce rtg záření s pevnou látkou. Absorpce rtg záření a její využití. Strukturní rentgenografie – využití difrakce rtg záření ke studiu struktury, Braggova rovnice. Difrakce na krystalové mřížce - Laueho metoda, Ewaldova konstrukce. Základy teorie rtg difrakce. Fyzikální podstata jevu - atom jako rozptylové centrum. Základní metody studia mono- a polykrystalických materiálů. Moderní metody. Hmotnostní spektrometrie. Moessbauerova spektroskopie. Nukleární magnetická rezonanční spektroskopie.

Termická analýza (křivky chladnutí, DTA, fDSC, cDSC). Rozšířená termická analýza (TG, TFIR, MS, Dilatometrie, atd.). Vlastnosti materiálů a jejich zkoušení. Délková a objemová roztažnost. Tepelná a elektrická vodivost. Korozní a chemické zkoušky. Druhy zkoušek mechanických vlastností materiálů. Statické a dynamické (rázové, cyklické). Nízkoteplotní a vysokoteplotní. Statické zkoušky pevnosti a creepu. Mez únavy. Typy lomu. Testování tvrdosti.

2. Nekovové materiály

Charakteristické vlastnosti makromolekulárních látek. Střední molekulová hmotnost, polymerizační stupeň, distribuční křivka, metody měření molekulových hmotností polymerů. Termodynamické a strukturně funkční podmínky vzniku makromolekul. Konfigurace a konformace polymerů. Základní charakteristiky stupňových a řetězových polymerizací. Odlišnosti a příklady typických zástupců polymerizačních reakcí. Polykondenzace. Technické polymery: polyestery, polyamidy, fenol-, močovino- a melamino-formaldehydové pryskyřice, polysiloxany. Termoplasty a termosety. Termické chování polymerů, teplota skelného přechodu, fyzikální a skupenské stavy, viskoelastická.

Technické polymery připravované polyadící: polyurethany, epoxidové pryskyřice. Radikálové polymerizace: mechanismus, iniciace, propagace, terminace, přenosové reakce, inhibitory a retardéry, kinetika radikálové polymerizace, gelový efekt, kopolymerizace. Způsoby provádění řetězových polymerizací: bloková, roztoková, suspenzní a emulzní polymerizace. Kationtová a aniontová polymerizace: iniciátory, růst řetězce, terminace a přenos, živé polymery, iontové kopolymerizace.

Koordinální stereospecifické polymerizace, Ziegler-Nattovy katalyzátory. Polymery připravované řetězovou polymerizací: polyethylen, polypropylen, polystyren, polyvinylchlorid, polytetrafluoroethylen, polyvinylalkohol, polyvinylacetát, polymethylmethakrylát, (postup výroby, vlastnosti a aplikace).

Kopolymery: butadien-styrenový kaučuk, butadienakrylonitrilový kaučuk, houževnatý polystyren, kopolymery styren-akrylonitril, ABS, (postup výroby, vlastnosti a aplikace). Přírodní polymery: polysacharidy: celulóza, škrob, hemicelulosa, lignin, přírodní kaučuk, gutaperča. Speciální polymery, tepelně odolné polymery, elektrovedivé polymery, polymery využívané v lékařství, dendrimery, perspektiva využití polymerů. Mechanické vlastnosti polymerů a metody jejich stanovení.

Syntéza tenkých filmů (CVD, PVD). Příprava pigmentů. Vlastnosti nanočástic (elektronová struktura, klastry, krystalografie, magnetické a optické vlastnosti, termodynamické vlastnosti povrchu a jádra, reaktivita). Aplikace nanočástic (senzory, katalýza, nanotechnologie, medicína, atd.). Metody a příklady syntézy nanočástic. Bottom-up & top-down, syntéza z plynné fáze, pyrolýza, mokrá syntéza z prekurzorů, sol-gel, práškové metody, atd.) Příprava nanočástic (kvantové tečky, CNTs, nanokompozity).

3. Teoretické metody studia struktury a vlastností materiálů

Elektronová struktura materiálů. Vlastnosti elektronů (difrakce, elektrony jako částice i záření, kvantová čísla). Schrodingerova rovnice. Elektronová stavba atomů a molekul. Chemická vazba (polární, nepolární, iontová, kovová). Molekuly a látky v elektrickém poli (polarizovatelnost, dipolový moment, permitivita dielektrika, průchod světla). Index lomu a molární refrakce. Rtg. fluorescence. Absorpce UV a vis. Záření (elektronová spektroskopie). Absorpce IČ a MW záření (spektra vibrační, rotační). Ramanova spektroskopie. Molekuly v magnetickém poli. Magnetická indukce, magnetizace, anisotropie magnetické susceptibility. Dielektrika, paramagnetika, ferromagnetika. Základní vlastnosti dielektrik dielektrika a feroelektrika, piezoelektricitá, statická permitivita, optické vlastnosti dielektrik.

Chemická kinetika a její metody. Rychlost reakce, rychlostní konstanta, řád reakce. Určení řádu reakce (metoda počátečních rychlostí, integrační, frakčních časů, izolační). Reakční mechanismus a rychlostní zákony (molekularita, elementární reakce). Problematika kinetiky chemických reakcí. 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).

Diferenciální podmínka fázové rovnováhy, integrální podmínka fázové rovnováhy. Souvislosti mezi fázovými, fyzikálními a mechanickými vlastnostmi. Fázové pravidlo a stabilita fází. Tuhé roztoky a intermediální fáze, intermetalika. Semiempirické (CALPHAD) a Ab-initio výpočty typu fázových diagramů.

Statistická termodynamika. Molekulární stavy a jejich distribuce. Boltzmannovo rozdělení a partiční funkce. Vztah termodynamických vlastností k partiční funkci. Statistická termodynamika reálných plynů a tekutin. Statistická termodynamika směsí: model regulárního roztoku. Statistická termodynamika ideálního krystalu.

Drudeho model elektronového plynu, elektrická a tepelná vodivost elektronového plynu Sommerfeldův model, Fermiho koule, hustota stavů Elektrony v periodickém potenciálu, pásová struktura Fermiho plocha. Kmity krystalové mřížky. Klasický popis harmonického krystalu, akustické a optické fonony interakce fononů s elmag. polem, polaritony. Elementy kvantového popisu, Debyeho model.

Literatura:

- ATKINS, Peter William. Physical chemistry. 6th ed. Oxford: Oxford University Press, 1998. ISBN 0-19-850101-3.
- SCHUBERT, Ulrich a Nicola HÜSING. Synthesis of Inorganic Materials. Weinheim: Wiley-VCH, 2000. 396 s. ISBN 3-527-29550-X.
- MÜLLER, Ulrich. Inorganic Structural Chemistry. 2. vyd. : John Wiley & Sons., 1993. ISBN 0-471-93717-7.
- INTERRANTE, L. V. a M. J. HAMPDEN-SMITH. Chemistry of Advanced Materials, An Overview. New York: Wiley-VCH, 1998. ISBN 0-471-18590-6.
- BRUCE, D. W. a D. O'HARE. Inorganic Materials. Chichester: John Wiley & Sons, 1997. ISBN 0-471-96036-5.
- YANAGIDA, H. a K. KUNIHITO a M. MIYAYAMA a H. YAMADA. The Chemistry of Ceramics. : John wiley & Sons, 1996. ISBN 0-471-96733-5.
- WEST, Anthony R. Basic Solid State Chemistry. Second Edition. Chichester: John Wiley & Sons, 1999. ISBN 0-471-987565-5.
- WELLER, Mark. Inorganic Materials Chemistry. Oxford, UK: Oxford University Press, 1994. ISBN 0-19-855799-X.
- CALLISTER, William D. Fundamentals of materials science and engineering : an interactive e.text. 5th ed. New York: John Wiley & Sons, 2001. ISBN 0-471-39551-.
- I.Prokopová, Makromolekulární chemie, VSCHT Praha, 2004.
- ELIAS, Hans-Georg. Macromolecules. Weinheim: Wiley-VCH, 2008. ISBN 978-3-527-31174.
- BOUBLÍK, Tomáš. Statistická termodynamika. Vyd. 1. Praha: Academia, 1996. 199 s. ISBN 80-200-0566-8.
- GILLESPIE, Ronald J. a Paul L. A. POPELIER. Chemical bonding and molecular geometry : From Lewis to Electron Densities. Edited by Petr C. Ford. Oxford: Oxford University Press, 2001. 267 s. ISBN 0-19-510496-.
- ZELEWSKY, Alexander von. Stereochemistry of coordination compounds. Chichester: John Wiley & Sons, 1995. ISBN 0-471-95057-2.
- Nanomaterials and nanochemistry. Edited by C. Brechignac - P. Houdy - M. Lahmani. Berlin: Springer, 2007. ISBN 978-3-540-72992.
- PORTER, David A. Phase Transformations in Metal and Alloys. New York: Van Nostrand Reinhol, 1981. 445 s. ISBN 0-442-30439-0.

- ZANGWILL, Andrew. Physics at surfaces. 1st pub. Cambridge: Cambridge University Press, 1988. ISBN 0-521-34752-1.
- MASEL, Richard I. Chemical kinetics and catalysis. New York: John Wiley & Sons, 2002. ISBN 0-471-24197-0.
- HOVORKA, František. Technologie chemických látek. Praha: Vydavatelství VŠCHT Praha, 2005. 180 s. ISBN 80-7080-588-9. URL
- MLEZIVA, Josef. Polymery - výroba, struktura, vlastnosti a použití. 1. vyd. Praha: Sobotáles, 1993. 525 s. ISBN 80-901570-4-1.