

Specializace **Fyzikální chemie**

Státní závěrečná zkouška sestává ze tří povinných předmětů, přičemž první z nich je povinný pro všechny specializace studijního programu Chemie.

- Metody chemického výzkumu
- Metody kvantové chemie a statistické termodynamiky
- Studium chemických, elektrochemických a nerovnovážných 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. Metody chemického výzkumu

Metody založené na absorpci gama záření (Moessbauerova spektroskopie). Metody založené na absorpci elektronů (hmotnostní spektroskopie – ionizace nárazem elektronů a chemická ionizace, analýza a detekce iontů, hmotnostní spektrum, fragmentace iontů, metastabilní ionty). 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 – typy přechodů, luminiscence, fluorescence, fosforescence, Jablonského diagram, vyhasínání luminiscence, přechody odpovědné za luminiscenci, typy excitace, instrumentace pro fluorescenční spektrometrii, fluorescenční značky a sondy). Molekuly v elektrickém poli (permitivita dielektrika, polarizovatelnost, indukovaná a orientační polarizace, indukovaný a permanentní elektrický dipólový moment). Přechod světla látkami (lom světla, refrakce, polarimetrie, polarizované světlo - vlastnosti a vznik, polarimetrie, optická rotační disperze, Cottonův jev, cirkulární dichroismus, CD spektrometrie). Molekuly v elektrickém poli světelné vlny (Rayleighův a Ramanův rozptyl, Ramanova spektroskopie – pružný a nepružný rozptyl elektromagnetického záření, Stokesovy a anti-Stokesovy linie v Ramanově spektru, polarizovatelnost, SERS, LASER – princip funkce, druhy laserů, disperzní a FT-RA spektrometry). Metody založené na absorpci infračerveného a mikrovlnného záření (spektra rotační, vibrační a rotačně-vibrační, princip vzniku infračervených spekter, dipólový moment a symetrie molekul, valenční a deformační vibrace vazeb, měření IR spekter v transmisním módu, ATR měření, FTIR, Michaelsonův interferometr). 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).

Separční metody: Plynová chromatografie (instrumentace, způsoby dávkování vzorku, kolony náplňové a kapilární, složení stacionárních fází, typy konvenčních detektorů, retenční charakteristiky v plynové chromatografii (retenční čas, redukovaný a mrtvý čas, kapacitní poměr), Van Deemterova a Golayova rovnice, kvalitativní a kvantitativní analýza (vnitřní normalizace, metoda standardního přídatku, absolutní kalibrace, kalibrace s vnitřním standardem, fingerprinting), Inverzní a vícedimenzionální plynová chromatografie, spojení GC-MS). Kapalinová chromatografie (základní princip chromatografické separace, kolonová chromatografie, vysokoúčinná kapalinová chromatografie. Instrumentace v kapalinové chromatografii, částicové a monolitické stacionární fáze, rozdělení separačních mechanismů (reverzní fáze, normální fáze, hydrofilní interakce, iontová výměna, stericá vyluka), charakterizace kolon a retenční charakteristiky (retenční čas, retenční faktor, rozlišení, účinnost, selektivita, van Deemterova rovnice), možnosti gradientové eluce, ultra vysokotlaká kapalinová chromatografie, převod metody, vícerozměrné separační techniky, převod frakce, ortogonalita, superkritická fluidní chromatografie a její aplikace, základy preparativní a tenkovrstvé chromatografie, spojení LC-MS: ionizační techniky v LC-MS: ESI, APCI, APPI, APLI, praktické aspekty: vliv parametrů interface, matrice, průtoku a složení mobilní fáze. Čipy pro LC-MS). Kapilární elektroforéza (elektroforéza, elektroosmóza, elektroforetická pohyblivost, elektroforetický tok, pufr, instrumentace pro kapilární elektroforézu, účinnost elektroforetické separace, izotachoforéza, Kohlrauschova regulační funkce, samozaostřovací efekt, spojení CE-MS).

Elektroanalytické metody: Redox, elektroda a elektrodový potenciál (Galvani, Volta, standardní, formální, absolutní), Fermiho energie, elektrochemický článek, potenciometrie, ISE a pH elektroda, polarizace elektrody, přepětí (Butler-Volmer a Tafel). Potenciostatické/galvanostatické techniky, stacionární voltametrie (RDE, μ elektroda), nestacionární voltametrie (LSV, CV, pulzní metody), metody založené na úplné elektrolýze, analytické aplikace, senzor, biosenzor, nanosenzor.

Metoda s indukčně vázaným plazmatem: Atomizace, ionizace, stimulovaná emise, instrumentace, laserová ablace, spojení ICP-MS.

Metody termické analýzy: Tepelné zpracování materiálů, křivky chladnutí, kalorimetrické metody stanovení tepla fázových přeměn a tepelné kapacity materiálů, základní metody termické analýzy (TGA, DTA, DSC, simultánní termická analýza). Fázové přeměny 1. a 2. řádu.

2. Metody kvantové chemie a statistické termodynamiky

Úvod do kvantové chemie: Vlnová povaha hmoty a částice v jednorozměrné potenciálové jámě. Ion typu vodíku, moment hybnosti, mnohaelektronové atomy. Interakce dvou AO na různých centrech, metoda fragmentových orbitalů a její aplikace na některé modelové systémy. Interakce mezi dvěma fragmentovými orbitály: lineární AH_2 a trigonální AH_3 Interakce mezi třemi fragmentovými orbitály: lomená AH_2 a pyramidální AH_3 .

Metody kvantové chemie: Postuláty a teorémy kvantové mechaniky. Variační metoda. Obyčejná Hückelova metoda a rozšířená Hückelova metoda. Metoda SCF – princip. Metoda HF-SCF – rovnice, energie, fyzikální význam a limitace.

Kvantová chemie a spektroskopie: Částice na kruhu a sféře, rotace molekul. Částice v parabolickém potenciálu a vibrace molekul. Princip výběrových pravidel a jejich znění pro rotační a vibrační přechody. Vibračně-rotační spektra. Elektronové přechody a Franck-Condonův princip. Elektronová paramagnetická rezonance: operátory a vlastní funkce spinu, elektronový a jaderný spin v magnetickém poli, parametry EPR spinového Hamiltoniánu a jejich vztah ke struktuře molekul.

Statistická termodynamika. Postuláty statistické termodynamiky. Populace stavu, konfigurace systému a její váha. Boltzmannovo rozdělení. Molekulární partiční funkce a její příspěvky (translační, rotační, vibrační, elektronový). Molekulární partiční funkce a vnitřní energie a tepelná kapacita. Boltzmannův vztah pro entropii. Mikrokanonický, kanonický a grand-kanonický soubor. Dominantní konfigurace a fluktuace. Kanonická partiční funkce a její vztah k termodynamickým veličinám (U , A , S , G). Vztah mezi molekulární a kanonickou partiční funkcí. Statistické vyjádření chemické rovnováhy a výpočet rovnovážné konstanty reakce. Fyzikální statistiky. Statistická termodynamika ideálních a reálných plynů, kapalin (buňková teorie, distribuční funkce) a krystalů (Einsteinův a Debyeův model). Fonony, vibrační a konfigurační entropie.

3. Studium chemických, elektrochemických a nerovnovážných 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 (1. a 2. Fickův zákon).

Elektrický dipólový moment (permanентní, indukovaný). Polarizovatelnost a struktura. Nekovalentní interakce. Pravá a nepravá vodíková vazba. Gaussův zákon elektrostatiky. Polární dielektrikum ve statickém a proměnném elektrickém poli. Teorie elektrické polarizace (Debye, Onsager, Kirkwood, Frölich). Dielektrická relaxace. Komplexní permitivita. Dielektrická spektroskopie. Disperze světla. Molární refrakce a struktura molekul. Optoelektrický jev (Kerr). Starkův efekt. Dielektrické vlastnosti nanomateriálů a metamateriálů.

Rovnovážná elektrochemie – redox, elektroda a elektrodový potenciál (Galvani, Volta, standardní, formální, absolutní), Fermiho energie, elektrochemický článek, potenciometrie, ISE a pH elektroda Nernstův a Donnanův potenciál, rovnovážné konstanty. Dynamická elektrochemie – elektrolýza, transport a transfer elektronu, Marcusova teorie, polarizace elektrody, aktivační přepětí (Butler-Volmer a Tafel), výměnná proudová hustota, koncentrační (difúzní) přepětí, kinetika elektrodových procesů, potenciostatické/galvanostatické metody, stacionární a nestacionární voltametrie. Elektrochemické sensory. Kombinované elektrochemické metody

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

Literatura:

- Atkins, Peter W. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford: Oxford University Press, 1998. 1014 s. ISBN 0-19-850101-3.
- Atkins, P., de Paula J. *Fyzikální chemie. z angl.orig. 9.vyd.*, Praha, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, vyd. 1., 2013. 915 s. ISBN 978-80-7080-830-6.
- Kalous, V. a kol. *Metody chemického výzkumu*. 1. vyd. Praha: SNTL – Nakladatelství technické literatury, 1987.
- Kratochvíl, Bohumil a Lubor JENŠOVSKÝ. *Úvod do krystalochemie*. 1. vyd. Praha: SNTL – Nakladatelství technické literatury, 1987.
- Holba, V. *Fyzikálno-chemické vlastnosti atomů a molekul*, SPN Bratislava 1980. 278 s.
- Exner, Otto. *Struktura a fyzikální vlastnosti organických sloučenin*. 1. vyd. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1985.
- Barker, James. *Mass spectrometry: analytical chemistry by open learning*. Edited by David J. Ando. 2nd ed. Chichester: John Wiley & Sons, 1998. 509 s. ISBN 0-471-96764-5.
- Lakowicz, Joseph R. *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. 3rd. ed. Springer US, 2006. 954s. ISBN 978-0-387-46312-4.
- WORKMAN, Jerry a Art W. SPRINGSTEEN. *Applied Spectroscopy a Compact Reference for Practitioners*. San Diego: Academic Press, 1998. ISBN 9780127640709.
- COLTHUP, Norman B., Lawrence H. DALY a Stephen E. WIBERLEY. *Introduction to infrared and Raman spectroscopy*. Third edition. San Diego: Academic Press, [1990]. ISBN 978-0121825546.
- *Introduction to Modern Liquid Chromatography*, Lloyd R. Snyder Joseph J. Kirkland John W. Dolan, 2009 John Wiley & Sons, Inc.
- *Analytická separace látek*. Jaroslav Churáček a kol., 1. vyd. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1990.
- <https://www.rozing.com/>
- Kromidas, S. *The HPLC-MS Handbook for Practitioners*. 1st Ed., Wiley-VCH. ISBN:9783527343072.
- Nováková, J.; Douša, M. a kol. *Moderní HPLC separace v teorii a praxi I a II*. 1. vyd., Hradec Králové, 2013, ISBN 978-80-260-4243-3.
- Foret, F., Křivánková, L., Boček, P.: *Capillary Zone Electrophoresis*, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, Germany, 1993.

- Dolník, V., Úvod do kapilární elektroforézy, Brno, 1994. High Performance Capillary Electrophoresis. A primer. Revised edition by H.H. Lauer and G. P. Rozing, Agilent Technologies, Germany 2009.
- Wang, Joseph *Analytical Electrochemistry*. 2nd ed. Wiley-VCH Publishers, N.Y. 2000. ISBN 0-471-28272-3.
- Scholtz, Fritz *Electroanalytical Methods*. 2nd ed. Springer Heidelberg, 2010. 366s. ISBN: 978-3-642-02914-1.
- Barek Jiří, Štulík Karel, Opekar František *Elektroanalytická chemie*, učební texty UK, 2005.188 s. ISBN 80-246-1146-5.
- Montaser, Akbar; Golightly, D.W., Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry, 2nd Ed., Wiley-VCH, 1992, ISBN 0-471-18811-5
- Skoog, D.A., Analytická chemie, první vydání, VŠCHT, 2019, ISBN 978-80-7592-043-0
- Otruba, V., Vaculovič, T., 10. Kurz ICP, Spektroskopická společnost Jana Marka Marci, 2019, ISBN 978-80-88195-10-8
- Principles Of Thermal Analysis And Calorimetry, By Gaisford, S., Kett, V. & Haines, P. (Eds.), Royal Society of Chemistry, 2016. 2nd edition , ISBN 13: 9781782620518, ISBN 10: 1782620516
- John P. Lowe, Quantum Chemistry, 3rd Edition, kapitoly 6-11.
- Boublík, T. Statistická termodynamika. Vyd. 1. Praha: Academia, 1996. 199 s. ISBN 80-200-0566-8.
- Vřešťál, J. a Otyepka, M. Statistická termodynamika, stručný úvod, MU: Brno, 2004. ISBN 80-210-3372-X.
- Masel, R. I. Chemical kinetics and catalysis, John Wiley & Sons, 2001. ISBN 0-471-24197-0.
- Atkins, P., de Paula J. Fyzikální chemie, kap.17, VŠCHT Praha 2013. ISBN 978-80-7080-830-6.
- Raju, G.G. Dielectrics in Electric Fields, 2nd ed., vybrané kapitoly, CRC Press, 2017. 751 s. ISBN 978-1482231137.
- Wang, J. Analytical Electrochemistry. 2nd ed. Wiley-VCH Publishers, N.Y. 2000. 209 s. ISBN 0-471-28272-3.
- Scholtz, F. Electroanalytical Methods. 2nd ed. Springer Heidelberg, 2010. 366s. ISBN: 978-3-642-02914-1.
- Barek, J., Štulík, K., Opekar, F. Elektroanalytická chemie, učební texty UK, 2005.188 s. ISBN 80-246-1146-5.
- Fischer, O. a Kučera, I. Nerovnovážné soustavy: termodynamika nevratných chemických a buněčných procesů. 1. vyd. Praha: Státní pedagogické nakladatelství, 1987. 154 s.
- Coveney, P. V. a Highfield, R. Šíp času: cesta vědou za rozluštěním největší záhady lidstva. 1. vyd. Ostrava: Oldag, 1995. 472 s. ISBN 80-85954-08-7.
- Gleick, J. Chaos: vznik nové vědy. Translated by Jaroslav Sedlář - Renata Kamenická. 1. vyd. Brno: Ando Publishing, 1996. 349 s. ISBN 80-86047-04-0.
- Scott, A. (editor): Encyclopedia of Nonlinear Science, Routledge, New York and London, 2005