

## Specializace **Strukturální chemie**

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

- Metody chemického výzkumu
- Teoretické metody strukturální chemie
- Experimentální metody strukturální chemie

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.

## Metody chemického výzkumu

1. Přehled a základní principy spektroskopických metod (fyzikální podstata, energie, vlnové délky).
2. Přejchod světla hmotou (lom světla, polarimetrie, optická rotační disperze, Cottonův jev, cirkulární dichroismus).
3. Metody založené na absorpci infračerveného a mikrovlnného záření (symetrie molekul, spektra rotační a vibrační, infračervená spektroskopie, dipólový moment, Ramanova spektroskopie, polarizovatelnost).
4. Metody založené na absorpci ultrafialového a viditelného záření (elektronová spektroskopie, UV-VIS, Franck-Condonův princip).
5. Metody založené na absorpci gama záření a elektronů (Mössbauerova a fotoelektronová spektroskopie, rentgenová fluorescence).
6. Mikroskopické metody (elektronová mikroskopie, TEM, SEM, typy skenovacích sond, AFM, STM).
7. Hmotnostní spektrometrie (ionizace nárazem elektronů a chemická ionizace, hmotnostní spektrum, fragmentace iontů).
8. Separační metody (plynová a kapalinová chromatografie, HPLC, mobilní a stacionární fáze, typy detektorů). Elektroforéza.
9. Elektroanalytické metody (elektroda a elektrodový potenciál, potenciometrie, voltametrie, měření vodivosti).
10. Metody termické analýzy (kalorimetrie, entalpie, entropie, ITC).

### Literatura:

- 1) Peter W. Atkins, J. De Paula. *Fyzikální chemie*. Vyd. 1. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 2013. 944 s. ISBN 9788070808306.
- 2) V. Kalous a kol. *Metody chemického výzkumu*. 1. vyd. Praha: SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1987. 430 s.
- 3) J. Barker. *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.
- 4) J. Workman, Art W. Springsteen. *Applied Spectroscopy a Compact Reference for Practitioners*. San Diego: Academic Press, 1998. ISBN 9780127640709.
- 5) Norman B. Colthup, Lawrence H. Daly, S. E. Wiberley, *Introduction to infrared and Raman spectroscopy*. Third edition. San Diego: Academic Press, [1990]. ISBN 978-0121825546.
- 6) L. R. Snyder, J. J. Kirkland, J. W. Dolan, *Introduction to Modern Liquid Chromatography*, 2009 John Wiley & Sons, Inc.
- 7) J. Churáček a kol., *Analytická separace látek*. 1. vyd. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1990.
- 8) J. Nováková, M. Douša a kol., *Moderní HPLC separace v teorii a praxi I a II*. 1. vyd., Hradec Králové, 2013, ISBN 978-80-260-4243-3.

## **Teoretické metody strukturní chemie**

1. Symetrie a elektronová struktura malých molekul.
2. Částice v jámě, jednoelektronové systémy (atom vodíku, ionty atomů). Mnohaelektronové systémy.
3. Variační metoda. Lineární variace: polarizovatelnost atomu H a metoda MO-LCAO.
4. Obyčejná a rozšířená Hückelova metoda, populační analýza.
5. Metoda SCF a její rozšíření.
6. Tuhý rotor, rotační hladiny molekul a rotační spektra.
7. Harmonický oscilátor, vibrační hladiny, vibračně-rotační spektra. Elektronové přechody.
8. Molekulová mechanika.
9. Hyperplochy potenciální energie. Konformační prohledávání.
10. Molekulová dynamika. Výpočty volných energií.

### Literatura:

- 1) J. P. Lowe: *Quantum chemistry*, 3<sup>rd</sup> edition, Elsevier Academic Press, 2006, kapitoly 2-8, 10.
- 2) P. Atkins, J. de Paula, *Fyzikální chemie*, VŠCHT Praha, 2013, kapitoly 7-14.
- 3) A. R. Leach: *Molecular modelling: principles and applications*, 2nd ed. Prentice Hall: Harlow England; New York, 2001.
- 4) C. J. Cramer: *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, 2nd ed. John Wiley & Sons, New York, 2004.

## Experimentální metody strukturní chemie

1. Princip magnetické rezonance, spin v magnetickém poli a jeho interakce.
2. Elektronová paramagnetická rezonance, spektra EPR a jejich parametry (elektronový g faktor, hyperjemná interakce).
3. Vektorový model NMR experimentu, chemický posun a interakční konstanta, spinové echo.
4. Koherentní přenos polarizace, relaxace, nukleární Overhauserův jev.
5. Dvoudimenzionální NMR spektroskopie, homonukleární a heteronukleární.
6. NMR spektroskopie v pevném stavu, křížová polarizace, MAS, anizotropní interakce.
7. Vnitřní uspořádání krystalů.
8. Interakce RTG záření s krystalem.
9. Měření a zpracování difrakčních dat.
10. Strukturní faktor, řešení a upřesňování struktury.

### Literatura:

- 1) M. H. Levitt: *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, John Wiley & Sons, Chichester 2001.
- 2) J. Keeler: *Understanding NMR Spectroscopy*, John Wiley & Sons, Chichester 2005.
- 3) J. A. Weil: *Electron paramagnetic resonance: elementary theory and practical applications*, 2<sup>nd</sup> Edition, Wiley, 2007.
- 4) V. Valvoda, *Základy strukturní analýzy*, Karolinum, 1992.
- 5) C. Giacovazzo, *Fundamentals of Crystallography*, Oxford University Press, 2002.
- 6) W. Massa, *Crystal Structure Determination*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- 7) J. P. Glusker, K. N. Trueblood, *Crystal Structure Analysis: A Primer*, Oxford University Press, 2010.