

Obor **Fyzikální chemie** – doporučený studijní plán

1. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinné předměty					
C5020	Chemická struktura	2+2	2/0	zk	Brož
C5030	Chemická struktura - seminář	1	0/1	z	Brož
C5300	Statistická termodynamika	2+2	2/0	zk	Šob, Vřešťál
C7000	Oborový seminář I	2	0/2	z	Šob
C7001	Diplomová práce I	3	0/0/3	kz	vedoucí práce
C7050	Elektroanalytické metody	2+2	2/0	zk	Trnková
C7777	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	Přihoda
C9920	Úvod do kvantové chemie a elektronové struktury molekul	3+2	2/1	zk	Munzarová
Doporučené volitelné předměty					
_	Doporučené volitelné předměty	7			
Jarní semestr					
Povinné předměty					
C6250	Metody chemického výzkumu - praktikum	5	0/0/5	kz	Farková, Vrbková
C6320	Chemická kinetika	2+2	2/0	zk	Sopoušek
C6330	Chemická kinetika - seminář	1	0/1	z	Sopoušek
C6740	Elektrické vlastnosti molekul	2+2	2/0	zk	Trnková
C6950	Chemická exkurze	0	0/0	z	Janků
C6960	Odborná praxe	0	0/0	z	Šindelář
C8000	Oborový seminář II	2	0/2	z	Šob
C8001	Diplomová práce II	5	0/0/5	kz	vedoucí práce
Doporučené volitelné předměty					
_	Doporučené volitelné předměty	9			

2. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinné předměty					
C5340	Nerovnovážné systémy	2+2	2/0	zk	Kučera
C7777	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	Příhoda
C9000	Oborový seminář III	2	0/2	z	Šob
C9001	Diplomová práce III	12	0/0/12	kz	vedoucí práce
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	12			
Jarní semestr					
Povinné předměty					
CA000	Oborový seminář IV	2	0/2	z	Šob
CA001	Diplomová práce IV	20	0/0/20	kz	vedoucí práce
JA002	Pokročilá odborná angličtina - zkouška	2	0/0	zk	Hranáčová
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	6			

Doporučené volitelné předměty

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinně volitelné předměty					
C5320	Fyzikálně chemické základy NMR	3+2	2/1	zk	Sklenář, Fiala
C5380	Speciální laboratorní technika	1+2	1/0	zk	Černík
C5880	Základy stereochemie	2+2	2/0	zk	Černík, Toužín
C5885	Základy stereochemie - seminář	1	0/1	z	Černík, Toužín
C6335	Nanočástice	1+2	1/0	zk	Sopoušek
C7280	Elektrodová kinetika	2+2	2/0	zk	Trnková
C7700	Chemie nekovů	2+2	2/0	zk	Černík
C7740	Organokovové sloučeniny	1+2	1/0	zk	Novosad
C7780	Inorganic Materials Chemistry	2+2	2/0	zk	Pinkas
C8102	Speciální metody - praktikum	5	0/0/5	kz	Farková, Hrdlička, Lubal
Jarní semestr					
Povinně volitelné předměty					
C5305	Computational Thermodynamics	2+2	2/0	zk	Pavlů, Vřešťál
C6310	Symetrie molekul	2+2	2/0	zk	Kubáček
C6750	Materiálová chemie kovů	2+2	2/0	zk	Brož, Vřešťál
C6770	NMR Spectroscopy of Biomolecules	2+2	2/0	zk	Žídek, Fiala
C6790	Hmotnostní spektrometrie	2+2	2/0	zk	Brož, Vřešťál
C8400	Kvantová chemie pevných látek, výpočty elektronové struktury	2+2	2/0	zk	Šob
C9930	Metody kvantové chemie	2+2	2/0	zk	Munzarová

Obor Fyzikální chemie – státní závěrečná zkouška

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, komplex 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 kriteria 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.