

Okruhy ke státním závěrečným zkouškám v navazujících magisterských programech FCHT

Studijní program Chemie (N104)

Specializace Anorganická chemie (N104A)

3 povinné okruhy:

- Aplikovaná fyzikální chemie
- Metody určování struktury látek
- Systematická anorganická chemie a anorganická technologie

1 okruh volený studentem z:

- Chemie a fyzika pevných látek
- Koordinační chemie

Podrobná specifikace okruhů

Aplikovaná fyzikální chemie

vychází z předmětů

Kinetika chemických a fotofyzikálních dějů (všechny specializace),

Fyzikální organická chemie (Organická chemie),

Kvantová chemie, Teoretické principy anorganické chemie (Anorganická chemie),

Výpočty a vizualizace molekul (Organická a Makromolekulární chemie),

Fyzikální chemie polymerů (Makromolekulární chemie)

Část společná:

1. Základní principy kvantové mechaniky – vlnová funkce, orbitaly, Schrödingerova rovnice, moment hybnosti, spin, elektronová hustota, operátory
2. Kvantově-mechanický popis molekul, báze AO, symetricky přizpůsobené orbitaly, MO-LCAO, metody výpočtu, hraniční orbitaly, celková energie
3. Základy chemické kinetiky, rychlostní rovnice, reakční intermediáty, tranzitní stav
4. Srážková teorie, energetická hyperplocha, katalýza homogenní a heterogenní
5. Termodynamický popis roztoků, směšovací veličiny, solvatace
6. Termodynamická rovnováha, termochemie
7. Interakce látek s elektromagnetickým zářením – excitované stavy, rotace, vibrace, elektronové excitace, fotochemie

Část organická chemie:

8. Vztahy mezi strukturou a reaktivitou, korelační rovnice, isotopové efekty
9. Kyseliny a báze, obecná a specifická katalýza, kyselost a bazicita v nevodných roztocích, basicita vs. nukleofilita
10. Substituční a eliminační reakce, kompetice, druhy S_N a E reakčních mechanismů, variace tranzitního stavu, účast sousedních skupin, stereochemie
11. Aromatická substituce elektrofilní a nukleofilní, substituční efekty, aktivující skupiny, efekt odstupující skupiny, regioselektivita
12. Adice nukleofilní a elektrofilní, meziprodukty, tranzitní stavy, katalýza
13. Molekulové přesmyky a pericyklické reakce, součinné vs. nesoučinné, termické vs. fotochemické reakce, klasické a neklasické karbokationty
14. Radikálové reakce, efekt rozpouštědla, metody studia mechanismů, kinetika
15. Hydrolýza esterů karboxylových kyselin, Ingoldova klasifikace

Část anorganická chemie:

8. Symetrie molekul, transformační matice, teorie grup, tabulky charakterů, rozklad na neredukovatelné reprezentace, aplikace na vibrační stavy molekul a molekulové orbitaly
9. Atomy a ionty v ligandovém poli – termy, spin-orbitální interakce, multiplety, multipólový rozvoj potenciálu, parametry ligandového pole, Tanabe-Suganovy diagramy

10. Homogenní rovnováha v plynech a kapalinách, bilanční matice, nezávislé reakce, rovnovážný rozsah reakce, podmínky rovnováhy
11. Vodné roztoky, acidobazické a redoxní rovnováhy, konstrukce Pourbaixových diagramů
12. Koordinační komplexy – vazba, termodynamické a kinetické aspekty reaktivity, optické a magnetické vlastnosti.
13. Fázová rovnováha, podmínky rovnováhy, T-x diagramy, ternární diagramy – izotermální řezy a projekce ploch likvidu, pole primární krystalizace
14. Heterogenní rovnováhy kondenzovaná fáze-plyn, částečně otevřené systémy, Ellinghamovy, Kellogovy diagramy, $\log(a)$ -T diagramy, izoaktivitní řezy

Část makromolekulární chemie

8. Molární hmotnost polymerů, její průměry a distribuce
9. Rozměrové charakteristiky polymerních molekul
10. Změny termodynamických veličin při vzniku roztoku polymeru
11. Koligativní vlastnosti roztoků polymerů
12. Rozptyl světla z roztoků polymerů, dynamický rozptyl světla
13. Viskozimetrie roztoků polymerů
14. Frakcionace polymerů, fázové diagramy, srážecí a rozpouštěcí frakcionace

Metody určování struktury látek

vychází z předmětu Metody určování struktury látek

Společné

1. Molekulová spektroskopie, principy absorpce a emise záření, měření UV spekter.
2. Kvantitativní analýza v molekulové spektroskopii, Lambertův-Beerův zákon.
3. Základní principy infračervené a Ramanovy spektroskopie.
4. Hmotnostní spektrometrie – fyzikálně-chemická podstata, metody ionizace, hmotnostní detektory.
5. NMR spektroskopie, princip metody, vznik a vývoj NMR signálu.
6. Strukturní krystalografie – princip metody a použití v určování struktury látek.
7. Elektronová spektroskopie pro chemickou analýzu (ESCA), princip metody a použití.

Organická chemie

8. Měření a interpretace jednodimenzionálních NMR spekter jader vodíku, uhlíku a fluoru.
9. Interpretace dvoudimenzionálních NMR spekter – homonukleární (COSY) a heteronukleární (HSQC a HMBC) techniky.
10. Nukleární Overhauserův efekt a jeho význam v NMR spektroskopii.
11. Využití hmotnostní spektrometrie ve strukturní analýze, molekulová hmotnost, přesná hmota a izotopová distribuce molekulového iontu.
12. Interpretace MS spekter, fragmentační mechanismy.
13. Využití IČ spekter ve strukturní analýze.
14. Chiroptické metody (ECD a VCD) a jejich využití ve strukturní analýze organických sloučenin.

Anorganická chemie

8. Elektronová mikroskopie a elektronová difrakce, principy instrumentace, využití
9. Rentgenová a neutronová difrakce a strukturní analýza – principy, instrumentace využití
10. Rietveldova metoda – strukturní parametry, kvantitativní analýza, určení velikosti částic.
11. Fotoelektronová spektroskopie a rentgenofluorescenční analýza
12. Magnetometrie – metody detekce magnetické odezvy, typy měření, vyhodnocení dat
13. Metody termické analýzy – DTA, DSC, TGA, vzhazovací kalorimetrie, dilatometrie
14. Metody měření velikosti částic a měrného povrchu

Makromolekulární chemie (vychází také z předmětu Fyzikální chemie polymerů)

8. Metody stanovení molární hmotnosti (osmometrie, rozptyl el.mg. záření, SEC, princip univerzální kalibrace, Viskozimetrie, MALDI-TOF MS)
9. Metody stanovení rozměrů polymerních řetězců
10. TGA/DSC/DMA-principy, základní fázové přechody polymerů
11. Hodnocení vlastností polymerních tavenin
12. Hodnocení vulkanizačního procesu a polymerních sítí
13. Metody měření velikosti částic a měrného povrchu

Chemie a fyzika pevných látek

vychází z předmětů Chemie a fyzika pevných látek, Krystalochemie

1. Ideální krystal a jeho symetrie – prvky a operace symetrie, Bravaisovy mříže, bodové a prostorové grupy
2. Teorie difrakce, reciproká mříž, rentgenová strukturní a fázová analýza
3. Strukturní typy prvků, binárních a ternárních sloučenin, intermetalik, křemičitanů.
4. Poruchy krystalové struktury, jejich identifikace, termodynamický popis nestechiometrických fází.
5. Reakce a metody syntézy pevných látek, kinetika a mechanismus reakcí pevných látek, nukleace, difúze, tepelné rozklady, fázové transformace, transportní reakce.
6. Klasifikace pevných látek podle typu vazby, vazebné síly, iontový model, mřížová energie, Madelungova konstanta, kohezní energie.
7. Kvantová teorie pevných látek, pásový model, báze rovinných vln, teorie těsné vazby, báze lokalizovaných orbitalů, Fermiho energie a plocha, tepelná kapacita elektronů.
8. Dynamika krystalové struktury, akustické a optické fonony, fononové spektrum, tepelná kapacita, Debyeův a Einsteinův model, tepelná vodivost, tepelná roztažnost.
9. Elektrické transportní vlastnosti, transportní koeficienty, elektrická vodivost, rozptylové mechanismy, Seebeckův a Peltierův jev. Kovy, polovodiče, supravodivost.
10. Magnetické vlastnosti, původ magnetického momentu, Langevinův diamagnetismus, paramagnetismus lokalizovaných elektronů, Pauliho paramagnetismus kovů, feromagnetismus, feri- a antiferomagnetismus
11. Dielektrika, lokální elektrické pole, permitivita a polarizovatelnost, feroelektrické krystaly, piezoelektrický jev.
12. Optické vlastnosti, polarizace, dielektrická funkce, lom, dvojlom, optická odrazivost, excitony, barva pevných látek, lasery.

13. Mechanické chování pevných látek, elastické vlastnosti a konstanty, plastická deformace, dislokace, mechanický lom, tvrdost.
14. Amorfnní látky, struktura, uspořádání na krátkou vzdálenost, párová distribuční funkce, relaxace, skelný přechod, vlastnosti skel.

Koordinaační chemie

vychází z předmětu Koordinaační chemie

1. Koordinaační polyedry, isomerie, vazebné typy ligandů, možnosti popisu struktur.
2. Teorie valenční vazby, teorie krystalového pole: srovnání přístupu a možností.
3. Stabilizující faktory: HSAB, chelátový efekt, vliv elektronové konfigurace (kinetická inertnost).
4. Molekulové orbitály v koordinaačních sloučeninách. Pravidlo 18 elektronů, vliv π interakce.
5. Popis multielektronových systémů. Mikrostavby, spektroskopické termy, jejich štěpení vlivem okolí.
6. Vlastnosti koordinaačních sloučenin: barevnost.
7. Vlastnosti koordinaačních sloučenin: magnetismus.
8. Mechanismy přenosu elektronu v koordinaačních sloučeninách.
9. Mechanismy substitučních reakcí, vliv nezúčastněného ligandu, trans-efekt.
10. Změna vlastností volného a vázaného ligandu: CO, NO, N₂.
11. Změna vlastností volného a vázaného ligandu: deprotonace, hydrolýza, substituce s účastí báze.
12. Fotoreaktivita. Obecné principy, Jablonského diagram, typy reakcí, fotoredoxní děje.
13. Dvoujaderné komplexy můstkové, komunikace mezi centry. Komplexy s vazbou kov-kov: možnosti násobné vazby, stericitaa.
14. Klastry přechodných kovů: princip isolobality, strukturní typy, PSEPT.

Systematická anorganická chemie a anorganická technologie

vychází z předmětu Anorganická technologie

1. Reaktivita a struktura elementárních nekovů (atmosfilní prvky, vzácné plyny, víceatomové molekuly nekovů, polymerní pevné nekovy)
2. Molekulové sloučeniny nekovů (oxidy, halogenidy, halogenid-oxidy, hydridy); vztah struktury a reaktivity; mechanismy reakcí Lewisovských kyselin a bází
3. Oxokyseliny a oxoanionty; acidobazická a redoxní reaktivita
4. Anorganické kovalentní pevné struktury (oxidy, binární pevné kovalentní sloučeniny); vztah struktury, povahy vazby a chemické reaktivity
5. Iontové anorganické látky; reakce iontů ve vodných roztocích (stabilitaa a hydrolýza iontů)
6. Kovy; redoxní chování kovů; vliv těchto vlastností na formy kovů v přírodě a metody jejich výroby
7. Výroba kyseliny sírové ze síry, podmínky katalytické oxidace SO₂, dvoustupňová konverze, absorpce SO₃
8. Příprava syntézního plynu z plyných a kapalných paliv, syntézní okruh pro výrobu amoniaku
9. Výroba kyseliny dusičné, katalytická oxidace amoniaku, absorpce oxidů dusíku a jejich odstraňování z koncových plynů, dusíkatá hnojiva
10. Výroba sody amoniakálním postupem

11. Fosfátové suroviny, výroba fosforu, termické a extrakční kyseliny trihydrogenfosforečné, fosforečná hnojiva
12. Elektrolýza vody, výroba vodíku a kyslíku, Vodíkové hospodářství. Výroba, transport a skladování vodíku, konverze energie
13. Elektrolýza roztoků alkalických kovů amalgámovým, membránovým a diafragmovým způsobem
14. Sloučeniny chloru a jejich výroba
15. Výroba Al_2O_3 , základy teorie a technologie výroby hliníku