

Okruhy ke státním závěrečným zkouškám v navazujících magisterských programech FCHT

Studijní program Chemie (N104)

Specializace Makromolekulární chemie (N104B)

4 povinné okruhy:

- Aplikovaná fyzikální chemie
- Metody určování struktury látek
- Pokročilá makromolekulární chemie
- Výroba polymerů a monomerů

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, vhažovací 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

Pokročilá makromolekulární chemie

vychází z předmětu Mechanismy polymeračních reakcí

1. Termodynamické aspekty polyreakcí, enthalpický a entropický příspěvek, stropní teplota
2. Radikálové řetězové polyreakce, dílčí reakce, mechanismus a kinetika
3. Kationtové a aniontové řetězové polyreakce, iniciační reakce, mechanismus, živé polymerizace
4. Polyinzerce a metatize, mechanismus
5. Polymerizace cyklických monomerů, mechanismus, termodynamické aspekty, cyklické oligomery
6. Polymery připravované řetězovými polymerizacemi, reakční schéma, vlastnosti
7. Polykondenzace a polyadice, mechanismus, rovnovážný stav, nerovnovážné procesy, tvorba gelu
8. Polymery připravované polykondenzacemi a polyadicemi, reakční schéma, vlastnosti
9. Kopolymery, syntéza, vlastnosti, struktura, kopolymerační parametry a diagramy
10. Chemické reakce polymerů – polymeranalogické reakce, síťování a degradace polymerů

Výroba monomerů a polymerů

vychází z předmětu Výroba polymerů

1. Surovinová základna polymerní chemie (ropa, zemní plyn).
2. Monomery s násobnými vazbami (alkeny, styren, vinylhalogenidy, akryláty, dieny).
3. Cyklické monomery (cyklické estery, laktamy, laktony, cyklické siloxany).
4. Monomery s funkčními skupinami pro stupňovité polyreakce (isokyanáty, polykarboxylové kyseliny, polyoly, diaminy).

5. Způsoby provedení průmyslových polyreakcí. Polymerace v monomerní fázi, v přítomnosti rozpouštědla, suspenzní a emulzní polymerace, plynofázová polymerace.
6. Syntetické polymery s uhlíkatým hlavním řetězcem. Polyolefiny, polystyren, polydieny, polyvinylhalogenidy, polyakryláty.
7. Syntetické polymery obsahující C-O vazbu v hlavním řetězci. Polyacetal, polyethery, polyestery.
8. Syntetické polymery obsahující C-N vazbu v hlavním řetězci. Polyamidy, polyuretany
9. Polysiloxany
10. Vztahy mezi strukturou polymeru a jejich vlastnostmi a aplikacemi.
11. Využití plastů, elastomerů a vláken
12. Aplikace polymerů v obalové technice a spotřebním průmyslu.
13. Aplikace polymerů v automobilovém průmyslu, stavebnictví a textilním průmyslu.