Tematické okruhy pro státní závěrečnou zkoušku magisterského studia oboru
Fyzikální chemie

TO1 je povinný, 3 okruhy z TO2–TO8 jsou volitelné

TO1 Fyzikální chemie

1. **Stavové chování tekutin:** ideální plyn; reálné tekutiny (kubické stavové rovnice; viriálové stavové rovnice; teorém korespondujících stavů); stavové chování kapalin (koeficient izobarické roztažnosti a izotermické stlačitelnosti)
2. **Základy chemické termodynamiky:** termodynamické zákony; základní termodynamické funkce a jejich změny s T, p, V a při fázové přeměně; tepelné stroje; zkapalňování plynů; termochemie (Hessův a Kirchhoffův zákon, entalpická bilance, adiabatická teplota reakce); termodynamika směsí (ideální směs, dodatkové a směšovací veličiny, parciální molární veličiny, chemický potenciál, aktivita, základní modely pro aktivitní koeficienty neelektrolytů a elektrolytů)
3. **Fázové rovnováhy:** rovnováhy v jednosložkové soustavě; základní typy fázových diagramů (rovnováha l-g, l-l, s-l); Raoultův zákon; Henryho zákon; popis rovnováhy kapalina-pára s reálným chováním kapalné fáze; Nernstův rozdělovací koeficient; ideální a reálná rozpustnost pevné látky; pákové pravidlo
4. **Chemická rovnováha:** látková bilance chemické reakce; podmínka rovnováhy; rovnovážná konstanta (určení z experimentálních, nebo termochemických dat); možnosti ovlivnění chemické rovnováhy; chemická rovnováha jedné či dvou chemických reakcí; iontové rovnováhy (slabé jednosytné kyseliny a zásady, součin rozpustnosti, pufry)
5. **Základy chemické kinetiky:** rychlostní rovnice pro jednoduché reakce (n-tý řád); poločas reakce; závislost rychlostní konstanty na teplotě; chemická kinetika základních typů simultánních reakcí; základní mechanismy chemických reakcí
6. **Transportní jevy:** Membránové rovnováhy: osmotická a Donnanova rovnováha. Transport: difuze (Fickovy zákony), migrace (měrná a molární vodivost), vztah mezi difuzí a vodivostí, konvekce.
7. **Elektrochemie:** Faradayův zákon. Galvanické články (typy elektrod, konvence, rovnovážné napětí, Nernstova rovnice, typy článků, termodynamika článku).
8. **Základy chemie povrchů:** Povrchové napětí, mezifázová energie a mezimolekulární síly. Laplaceův tlak, kapilární elevace a deprese, rozestírání. Chemický potenciál kapky (Kelvinova rovnice, homogenní nukleace). Adsorpce (druhy adsorpce, izotermy, povrchový přebytek a Gibbsova adsorpční izoterma). Surfaktanty, povrchový tlak.
9. **Základy statistické termodynamiky:** Postuláty, statistické soubory, partiční funkce, Boltzmannova pravděpodobnost a Boltzmannova rovnice pro entropii. Ideální plyn a reakce v plynné fázi. Molekulární modelování (silové pole, molekulová mechanika a dynamika, simulace metodou Monte Carlo).
10. **Základy kvantové chemie a molekulárního modelování:** Schrödingerova rovnice, operátory fyzikálních veličin, moment hybnosti, atom vodíku a víceelektronové atomy, elektronový spin a Pauliho vylučovací princip, Bornova-Oppenheimerova aproximace, Hartreeho-Fockova metoda, korelační energie.
11. **Spektroskopie:** Interakce atomů a molekul s elektromagnetickým zářením (atomová a molekulová spektra); základní principy optiky (odraz, lom, difrakce, emise, absorpce, rozptyl); populace energetických stavů (Boltzmannův zákon); rotační, vibrační a elektronové přechody, spinové přechody; kvantitativní spektrometrie (Lambertův-Beerův zákon); obecné principy konstrukce optických spektrometrů; principy fotoelektronové spektroskopie

TO2 Chemická termodynamika

1. Kritický bod, teorém korespondujících stavů
2. Mezimolekulární síly – příčiny, základní typy popisu
3. Stavové rovnice
4. Doplňkové a reziduální veličiny reálného plynu - fenomenologie, termodynamický popis
5. Stavové chování směsí – směšovací pravidla, empirické „zákony“
6. Termodynamika roztoků neelektrolytů – směšovací a dodatkové veličiny (molární, parciální molární, aktivita, aktivitní koeficient), jejich experimentální stanovení a závislost na stavových proměnných
7. Podmínky termodynamické stability a fázové rovnováhy pro čisté látky a pro vícesložkové systémy
8. Možnosti korelace a odhadu aktivitních koeficientů
9. Rovnováha kapalina-pára – fenomenologie, experiment a termodynamické modelování (reálné chování kapalné i parní fáze)
10. Rozpustnost plynů v kapalinách – faktory ovlivňující rozpustnost, termodynamický popis
11. Rovnováha kapalina-kapalina v binárních a ternárních systémech – fenomenologie, experiment a princip výpočtu
12. Rovnováha kapalina-pevná fáze v binárních systémech – základní typy chování, experiment a termodynamický popis
13. Stechiometrie simultánních reakcí. Stechiometrické a nestechiometrické vyjádření látkové bilance chemických reakcí, určení počtu nezávislých reakcí
14. Tabelace termochemických dat a jejich přepočty na požadované podmínky či skupenství látek
15. Princip stechiometrického řešení chemické rovnováhy více reakcí
16. Princip nestechiometrického řešení chemické rovnováhy více reakcí
17. Iontové rovnováhy (slabé kyseliny a zásady, tlumivé roztoky, amfolyty)
18. Rovnováhy reakcí za účasti čistých pevných látek. Rozkladné teploty pevných látek.

TO3 Elektrochemie

1. Typy elektrod, HOMO-LUMO a redox energetika.
2. Nefaradaické děje, polarizace elektrody, nabíjecí proud, fázové rozhraní, model elektrické dvojvrstvy, adsorpce, elektrokapilární křivka.
3. Faradaické děje, elektrolytická cela, dvou- a tříelektrodové zapojení. Látkový transport, otázka migrace, difuzní vrstva, Fickovy zákony, reakce řízené látkovým přenosem, reverzibilita a Gibbsova volná energie, elektromotorická síla, Nernstova rovnice, referentní elektrody.
4. Potenciály kapalinových rozhraní.
5. Kinetika elektrodových reakcí: Rovnováha, Arrheniův vztah, přepětí, Tafelova rovnice a diagram, Butlerova-Volmerova rovnice, závislost proudu na přepětí, výměnný proud.
6. Potenciostatické techniky, difuze k planární elektrodě, Cottrellova rovnice, difuze ke kulové elektrodě, mikroelektrody.
7. Chronoampérometrie, chronocoulometrie.
8. Polarografie, Ilkovičova rovnice, rovnice reverzibilní vlny.
9. Analytické využití: pulzní a tastované polarografické metody: NPP, DPP, analýza křivek.
10. Cyklická voltametrie, reversibilní, quasi-reverzibilní a irreverzibilní systémy, vyhodnocení křivek, interpretace výsledků z hlediska mechanismu, vliv nabíjecího proudu.
11. Galvanostatické techniky: popis, Sandova rovnice, chronopotenciometrie.
12. Rotující disková elektroda, rychlostní profily kapaliny v blízkosti disku, koncentrační profily, rotující prstencová elektroda a tzv. "ring-disk", interpretace výsledků.
13. AC-techniky, měření faradaické impedance, náhradní obvod pro elektrochem. celu, Nyquistův diagram.
14. Elektrolýzy objemu roztoku, zásady konstrukce preparativní cely, coulometrie.
15. Potenciometrické titrace.
16. Anodická a adsorptivní rozpouštěcí (stripping) analýza.

TO4 Fyzikální chemie dějů na fázových rozhraních

1. Podmínka mechanické rovnováhy na zakřiveném rozhraní - Laplaceova-Youngova rovnice
2. Rovnováha mezi kapalnou a parní fází v systémech se zakřiveným rozhraním za konstantní teploty. Kelvinova rovnice
3. Smáčení a rozestírání, Youngova rovnice, úhel smáčení,
4. Rozestírání, rozestírací koeficient, kohezní a adhezní práce, Kapilární elevace a deprese
5. Povrchové filmy nerozpustných látek na kapalinách, povrchový tlak
6. Povrchové filmy na pevných látkách (filmy Langmuira a Blodgettové), Gibbsova adsorpční izoterma
7. Povrchové napětí čistých kapalin a roztoků, teplotní závislost povrchového napětí
8. Mezifázové napětí mezi dvěma kapalnými fázemi, teplotní závislost mezifázového napětí
9. Adsorpce plynů na pevných látkách, adsorpční izotermy, stanovení velikosti plochy povrchu a pórovitosti pevných látek, povaha adsorpce z hlediska adsorpčních sil
10. Adsorpce na porézních adsorbentech - kapilární kondenzace a adsorpční hystereze
11. Experimentální stanovení adsorpce na fázovém rozhraní pevná látka - plyn
12. Adsorpce z roztoků na pevných látkách - molekulární a iontová adsorpce
13. Elektrické vlastnosti fázových rozhraní, elektrická dvojvrstva, elektrokinetický potenciál, elektrokinetické jevy
14. Termodynamika elektrolytů (Newtonova-Planckova rovnice, Nernstova-Einsteinova rovnice, spojení difuze, migrace a konvekce)
15. Základy nerovnovážné termodynamiky – definice systému, lokální rovnováha, stacionární stav, Saxenovy relace, aplikace na binární systémy
16. Obecná rovnice kontinuity, produkce entropie
17. Definice rychlostí, hustot a toků hmoty pro vícesložkové systémy
18. Potenciál kapalinového rozhraní, Donnanova rovnováha, Donnanův potenciál, Hendersonova rovnice
19. Osmotický tlak (Morseho a van´t Hoffova rovnice), osmometrie, reverzní osmóza
20. Difuze v roztocích a membránách, metody stanovení difuzního koeficientu
21. Membránové separační procesy (principy, hnací síly, typy membrán)

TO5 Fyzikální chemie pevných látek

1. Geometrie krystalové struktury, prostorová mřížka, krystalografické soustavy, operace symetrie, grupy symetrie.
2. Strukturní typy prvků a sloučenin.
3. Reálný krystal, poruchy krystalové struktury, jejich rovnováha a interakce, metody zjišťování.
4. Difrakce rentgenového záření na krystalu, rentgenová strukturní analýza, rentgenová fázová analýza.
5. Reakce pevných látek, jejich kinetika a mechanismus, nukleace, difúze, tepelné rozklady, oxidace kovů, interkalace, adiční a výměnné reakce, transportní reakce, fázové transformace. Vazebné síly v pevných látkách, mřížková energie.
6. Kovalentní, iontové a molekulární krystaly, pevné roztoky, intermediální fáze.
7. Kvantová teorie pevných látek, pásový model, Brillouinovy zóny.
8. Fyzikální vlastnosti pevných látek a jejich souvislost s vnitřní strukturou.
9. Mechanické chování, elasticita, plasticita, tečení, mechanický lom, tvrdost.
10. Dynamika struktury pevných látek, teplotní modely, tepelná vodivost a roztažnost.
11. Elektrická vodivost, kovy, polovodiče, izolanty, iontové vodiče, supravodiče.
12. Magnetické chování, diamagnetismus, paramagnetismus, feromagnetismus, antiferomagnetismus, ferimagnetismus.
13. Optické vlastnosti, polarizace, lom, dvojlom, barva pevných látek, laser.
14. Amorfní látky, jejich struktura a vlastnosti.

TO6 Chemická fyzika

1. Postuláty kvantové mechaniky. Časově závislá a bezčasová Schrödingerova rovnice.
2. Matematika kvantové mechaniky: operátory, vlastní čísla, vlastní funkce, linearita operátorů, Hilbertův prostor, vlastnosti hermitovských operátorů, komutační relace, princip neurčitosti.
3. Jednoduché kvantově-mechanické modely. Částice v 1D a 3D krabici. Metoda separace proměnných. Odhady výpočtů excitačních energií jednoduchých systémů. Harmonický oscilátor.
4. Rotační pohyb a moment hybnosti. Operátory a jejich vlastní hodnoty, zákony zachování. Rotační hladiny.
5. Elektronový spin antisymetrie vlnové funkce. Pauliho princip. Sternův-Gerlachův experiment. Hartreeho-Fockova metoda.
6. Atomy. Atomy vodíkového typu. Mnohaelektronové atomy. Elektronové termy. Sčítání momentu hybnosti.
7. Výpočty vlastností molekul. Bornova-Oppenheimerova aproximace a hyperplocha potenciální energie. Báze atomových orbitalů. Kvalitativní teorie MO.
8. Metody výpočtů zahrnující korelační energii. Variační a poruchové přístupy, metody CC. Metody založené na funkcionálu hustoty.
9. Semiempirické metody. Hückelova metoda a modernější přístupy.
10. Statistická termodynamika: postuláty, pravděpodobnostní rozdělení, soubor. Klasický popis, ekvipartiční princip; kvantový popis, populace stavů.
11. Mikrokanonický, kanonický a grandkanonický soubor. Boltzmannova pravděpodobnost. Entropie a další termodynamické funkce.
12. Ideální plyn: Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení, termodynamické funkce ideálního plynu, rovnováhy v plynné fázi.
13. Reálný klasický plyn, viriálová stavová rovnice.
14. Kapaliny, korelační funkce a strukturní faktor.
15. Modelování v chemii: od hrubozrnného po QM/MM. Klasické molekulární modelování, síly mezi molekulami, silové pole, molekulová mechanika.
16. Molekulová dynamika: Verletova metoda, konstantní teplota v MD.
17. Simulace metodou Monte Carlo: Metropolisův algoritmus, kinetické MC.
18. Měření veličin v simulacích, průběh pseudoexperimentu a zpracování naměřených dat.

TO7 Spektroskopie

1. Interakce atomů a molekul s elektromagnetickým zářením
2. Základní principy optiky – odraz, lom, difrakce, absorpce, emise rozptyl, duální charakter elektromagnetického záření, lineárně a cirkulárně polarizované záření
3. Populace kvantových stavů, vliv teploty, degenerace stavů, doba života stavů.
4. Aplikace teorie grup ve spektroskopii – definice grupy, bodové grupy symetrie, maticové reprezentace, tabulky charakterů a jejich využití.
5. Atomová absorpční a emisní spektra, popis energetických stavů, dovolené a zakázané přechody, výběrová pravidla.
6. Rentgenová spektrální a difrakční analýza – principy a metody, RTG fluorescence, RTG difrakce, Laueho rovnice, Braggova rovnice, strukturní/fázové informace – práškové vzorky a monokrystaly.
7. Molekulová spektroskopie, společný teoretický základ - Jablonskiho diagram, elektronické, vibrační a rotační přechody, zářivé a nezářivé procesy, Born-Oppenheimerova aproximace, dipólový moment přechodu, výběrová pravidla.
8. Elektronická spektra – absorpční, emisní, časově rozlišená spektroskopie.
9. Vibrační spektroskopie - normální souřadnice, normální vibrační módy, harmonický a anharmonický oscilátor, koncept vibračních módů funkčních skupin, infračervená a Ramanova spektrometrie.
10. Rotační spektra – typy setrvačníků, struktura molekul.
11. Teoretické principy kvantitativní analýzy, metody multikomponentní analýzy.
12. Obecná konstrukce optických spektrometrů - zdroje záření, detektory, optické materiály a jiné prvky spektroskopických přístrojů.
13. NMR a EPR spektroskopie – principy metod, sklápěcí pulsy a pulsní sekvence, volné vyhasínání magnetizace a relaxační procesy, 1D NMR spektra a jejich základní interpretace, princip 2D NMR experimentů – COSY, HETCOR, NOESY; EPR spektra.
14. Fotoelektronová spektroskopie (UPS, XPS, ESCA), spektroskopie Augerových elektronů, analýza povrchů.
15. Spektrální zobrazování a mapování, principy mikrospektroskopie, optická mikroskopie blízkého pole.

TO8 Chemická kinetika

1. Základní pojmy chemické kinetiky: definice rychlosti reakce, rychlostní rovnice, řád reakce, rychlostní konstanta.
2. Teplotní závislost rychlostní konstanty, Arrheniova rovnice. Souvislost chemické kinetiky a termodynamiky.
3. Elementární a složené reakce, reakční mechanismus. Rozdělení chemických reakcí z pohledu chemické kinetiky.
4. Integrace rychlostních rovnic pro základní typy reakcí.
5. Experimentální metody chemické kinetiky (vsádkový, průtokový a trubkový).
6. Studium rychlých a ultrarychlých reakcí. Zábleskova fotolýza, femtochemie. Relaxační metody-
7. Kinetická analýza homogenních reakcí. Integrální a diferenciální metoda, metoda poločasů. Izolační metoda.
8. Řešení komplexních kinetických schémat. Paralelní, následné a bočné reakce. Metoda Laplaceovy transformace.
9. Numerické metody v chemické kinetice. Eulerova metoda, metody Rungeho-Kuttovy.
10. Aproximace stacionárního stavu. Mechanismus a chemická kinetika.
11. Lineární řetězové reakce. Řetězové polymerace.
12. Rozvětvené řetězové reakce. Exploze.
13. Oscilační reakce, Belousova-Žabotinského reakce.
14. Koncept katalýzy. Homogenní a heterogenní katalýza.
15. Povrchově katalyzované reakce. Langmuirova adsorpční izoterma, disociativní adsorpce a koadsorpce. Chemisorpce a fyzikální sorpce. Langmuirův-Hinshelwoodův a Eleyův-Ridealův mechanismus.
16. Kinetika enzymatických reakcí: kompetitivní, nekompetetivní a antikompetitivní inhibice.
17. Reakce v roztocích. Difúzně a chemicky řízené reakce. Reakce v roztocích řízené chemickým dějem. Vliv tlaku, permitivity, iontové síly.
18. Srážková teorie, stérický faktor.
19. Teorie tranzitního stavu. Odhad stérického faktoru. Koncept hyperplochy potenciální energie, reaktanty, produkty a aktivační energie.
20. Základy fotochemie. Jablonskiho diagram, zářivé a nezářivé přechody. Kvantový výtěžek, kinetika fluorescence.

Aktualizováno 9.6.2015