

Obor **Strukturní chemie**

Státní závěrečná zkouška sestává ze tří povinných předmětů

- Elektronová struktura molekul a teorie spektroskopických metod
- Teoretické metody strukturní chemie
- Experimentální metody strukturní 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.

Okruhy otázek:

Elektronová struktura molekul a teorie spektroskopických metod

1. Základní pojmy kvantové mechaniky, atom vodíku.
2. Atomy s více elektrony.
3. Jednoduchá Hückelova metoda a struktura planárních uhlovodíků.
4. Symetrie molekul.
5. Elektronová struktura malých molekul: Molekuly H_2^+ , A_2 , AB , AH_2 , AH_3 , AH_4 .
6. Elektronová struktura pevných látek.
7. Principy molekulové spektroskopie: absorpce, emise, rozptyl záření, šířka a intenzita linií, princip výběrových pravidel.
8. Rotační spektra.
9. Vibrační spektra.
10. Elektronová a fotoelektronová spektroskopie, elektronová paramagnetická rezonance.

Literatura:

- J. P. Lőwe, Kirk A. Peterson: Quantum Chemistry - Third Edition, Elsevier Academic Press, 2006.
- Y. Jean, F. Volatron, An Introduction to Molecular Orbitals, Oxford University Press, 1993.
- J. M. Hollas: Modern Spectroscopy - Fourth Edition, John Wiley & Sons, Chichester 2009.

Teoretické metody strukturní chemie

1. Metody Hartreeho a Hartreeho-Focka.
2. Báze v ab initio výpočtech.
3. Variační metoda. Metoda konfigurační interakce.
4. Poruchová metoda. Metody MP a CC.
5. Metoda funkcionálu hustoty.
6. Molekulová mechanika.
7. Hyperplochy potencialní energie.
8. Konformační prohledávání.
9. Molekulová dynamika.
10. Výpočty volných energií.

Literatura:

- Ira N. Levine: Quantum Chemistry - 6th edition. Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2009.
- Frank Jensen: Introduction to Computational Chemistry. John Wiley & Sons, Chichester, 1999.
- W. Koch, M. C. Holthausen: A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Wiley-VCH, 2000.
- Andrew R. Leach: Molecular modelling: principles and applications, 2nd ed. Prentice Hall: Harlow England; New York, 2001.
- Christopher J. Cramer: Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd ed. John Wiley & Sons, New York, 2004.

Experimentální metody strukturní chemie

Magnetická rezonance

1. Princip jaderné magnetické rezonance.
2. Interakce jaderného spinu.
3. Vektorový model NMR experimentu, chemický posun, interakční konstanta.
4. Nukleární Overhauserův jev, přenos polarizace.
5. Dvojdímenzionální NMR spektroskopie.
6. NMR spektroskopie v pevném stavu.

Difrakční metody

7. Vnitřní uspořádání krystalů.
8. Interakce RTG záření s krystalem.
9. Měření a zpracování difrakčních dat.
10. Strukturní faktor, řešení a upřesňování struktur.

Literatura:

- M. H. Levitt: Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance, John Wiley & Sons, Chichester 2001.
- J. Keeler: Understanding NMR Spectroscopy, John Wiley & Sons, Chichester 2005.
- V. Valvoda, Základy strukturní analýzy, Karolinum, 1992.
- C. Giacovazzo, Fundamentals of Crystallography, Oxford University Press, 2002.
- W. Massa, Crystal Structure Determination, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- J. P. Glusker, K. N. Trueblood, Crystal Structure Analysis: A Primer, Oxford University Press, 2010.