

Státní závěrečné zkoušky a obhajoby bakalářských prací ve studijním programu Fyzikální a výpočetní chemie

1. Průběh státní závěrečné zkoušky (SZZ) bakalářského studijního programu " Fyzikální a výpočetní chemie" se řídí aktuálně platným "Studijním a zkušebním řádem Vysoké školy chemicko-technologické v Praze".
2. Místo konání státní závěrečné zkoušky a obhajoby bakalářských prací rozpis studentů bude zveřejněn 2 týdny před konáním SZZ a obhajob.
3. Státní závěrečná zkouška (SZZ) bakalářského studijního programu "Fyzikální a výpočetní chemie" se skládá z obhajoby bakalářské práce a ústní části SZZ.
4. Pro prezentaci výsledků bakalářské práce bude mít student k dispozici 10 minut, poté bude následovat diskuse k bakalářské práci a po ní ústní část SZZ. Prezentaci student zaměří především na uvedení cílů práce, stručný popis prostředků, metod a postupů použitých k dosažení cílů práce, přehled dosažených výsledků, jejich popis, charakterizaci a diskusi a na formulování závěrů vyplývajících z dosažených výsledků a závěrů o splnění zadání bakalářské práce. Dále následuje přečtení posudku vedoucího práce a student odpoví na otázky či připomínky z tohoto posudku a na otázky položené členy komise.
5. Při ústní části státní závěrečné zkoušky odpovídá student na otázky ze čtyř tematických okruhů (TO). Z toho **okruhy 1 a 2 jsou povinné (P)** a z **okruhů 3 až 6 si student vybírá jeden volitelný okruh (V)**.
6. Po ukončení ústní části SZZ následuje neveřejné hodnocení studenta komisí. Po uzavření klasifikace oznámí předseda komise výsledek obhajoby bakalářské práce, výsledek státní zkoušky a celkový výsledek studia studentovi.

Seznam povinných a volitelných tematických okruhů pro SZZ:

Č. TO		Název TO	Ústav
1	P	Matematika a fyzika	446, 444
2	P	Fyzikální chemie	403
3	V	Chemické inženýrství	409
4	V	Inženýrská informatika	446
5	V	Počítače a programování v chemii	446
6	V	Analytická chemie	402

Popis tematických okruhů

1. Matematika a fyzika (vychází z předmětů B413001 Matematika A, B413002 Matematika B, B444001 Fyzika A)

1. Definice derivace. Geometrický a fyzikální význam derivace. Parciální derivace a jejich geometrický význam, gradient funkce. Parciální derivace složené funkce. Derivace ve směru.
2. Newtonova a Riemannova definice určitého integrálu. Geometrické a fyzikální aplikace určitého integrálu. Věta o střední hodnotě integrálního počtu.
3. Diferenciální rovnice zejména 1. řádu, základní pojmy. Metoda separace proměnných. Lineární diferenciální rovnice 1. řádu, metoda variace konstanty.
4. Lineární diferenciální rovnice 2. řádu s konstantními koeficienty a speciální pravou stranou. Soustavy dvou diferenciálních rovnic 1. řádu. Model „Dravec-kořist“.
5. Matice, maticová algebra. Lineární závislost a nezávislost skupiny vektorů. Hodnost matice. Soustavy lineárních algebraických rovnic.
6. Determinant matice a jeho vztah k hodnotě matice. Inverzní matice – existence a metody výpočtu.
7. Funkce dvou proměnných a její graf, vrstevnice grafu funkce. Lokální extrémy funkce dvou proměnných a jejich určování, stacionární a sedlové body.
8. Implicitně zadané funkce, jejich existence a derivace.
9. Rovinné a prostorové křivky, tečný vektor. Vektorové pole. Křivkový integrál vektorového pole a jeho nezávislost na integrační cestě. Potenciál.
10. Dvojný integrál a jeho geometrický význam. Věta o substituci a Fubiniho věta. Laplaceův integrál.
11. Fyzikální veličiny a jednotky (skalární, vektorové veličiny, hodnota fyzikální veličiny, mezinárodní soustava jednotek, metody měření hodnot fyzikálních veličin, nejistoty měření).
12. Základní pojmy dynamiky translačního pohybu (okamžitá rychlost, okamžité zrychlení, síla, hybnost, pohybové zákony, práce, výkon, mechanická energie, zákony zachování hybnosti a mechanické energie).
13. Základní pojmy mechaniky rotačního pohybu (úhlová rychlost, úhlové zrychlení, moment síly, moment setrvačnosti, pohybové zákony, práce, výkon, mechanická energie).
14. Mechanika kontinua, hydromechanika (síly v kontinuu, deformace tělesa, Hookův zákon, hydrostatický tlak, Archimédův zákon, Bernoulliho rovnice, proudění reálné kapaliny, viskozita).
15. Základy vlnové a geometrické optiky (odraz a lom světla, interference a ohyb světla, optické mřížky, antireflexní vrstvy, zobrazování pomocí zrcadel a tenkých čoček, jednoduché optické přístroje).
16. Elektrostatické pole (intenzita a potenciál, elektrický dipól, polarizace dielektrika, energie elektrostatického pole).
17. Stejnoseměrné a střídavé proudy (Ohmův zákon, Jouleův zákon, Kirchhoffovy zákony, impedance, výkon a energie).
18. Magnetické pole (magnetická indukce, silové účinky magnetického pole a jejich aplikace, magnetické vlastnosti látek).
19. Elektromagnetické pole (elektromagnetická indukce, energie elektromagnetického pole, elektromagnetické vlnění).

2. Fyzikální chemie (vychází z předmětů B403018 Fyzikální chemie A+, B403019 Fyzikální chemie B+)

1. Stavové chování tekutin: kompresibilitní faktor, stavové rovnice (ideálního plynu, kubické, viriální), p – V diagram reálné tekutiny, kritický bod a podmínky platné v kritickém bodě, tlak nasycených par, stavové chování kapalin.
2. Chemická termodynamika: termodynamické zákony, základních termodynamické veličiny (vnitřní energie, práce, teplo, entalpie, entropie, Helmholtzova a Gibbsova energie) a jejich závislost na teplotě, tlaku/objemu, složení.
3. Vratné a nevratné děje, isothermní a adiabatický děj (vratný a nevratný), Carnotův cyklus, tepelné stroje.
4. Termochemie: tepelné kapacity, reakční teplo (za konstantního tlaku nebo objemu), standardní slučovací entalpie, Hessův a Kirchhoffův zákon, obecná entalpická bilance chemické reakce.
5. Termodynamika směsí: dodatkové veličiny, parciální molární veličiny, chemický potenciál, aktivita a její vyjádření pro složky v plynné fázi, v roztoku neelektrolytů a v roztoku elektrolytů, aktivitní koeficienty (Debye-Hückelův model a model regulárního roztoku).
6. Extenzivní a intenzivní kritéria rovnováhy. Gibbsův fázový zákon. Fázové rovnováhy v jedno složkové soustavě, diagramy čisté látky, Clapeyronova rovnice, Clausiova-Clapeyronova rovnice.
7. Fázové rovnováhy kapalina–pára a kapalina–plyn: fázové diagramy, Raoultův zákon, Henryho zákon, rovnovážné rovnice zohledňující reálné chování kapalné fáze.
8. Fázové rovnováhy kapalina–kapalina a kapalina–pevná fáze: základní typy fázových diagramů ve dvou a tříložkových systémech, rovnovážné rovnice, Nernstův rozdělovací zákon.
9. Chemická rovnováha jednoduchých reakcí: Gibbsova reakční izoterma, rovnovážná konstanta, látková bilance chemické reakce, vliv vnějších podmínek na výtěžek reakce, disociace slabých elektrolytů, součin rozpustnosti, pH.
10. Chemická kinetika jednoduchých reakcí: řád reakce, rychlostní konstanta, poločas reakce, kinetika reakcí prvního a druhého řádu, Arrheniova rovnice. Kinetika simultánních reakcí 1. řádu (reakce bočné, následné, vratné).
11. Elektrochemické procesy: elektrolytické články, Faradayovy zákony, klasifikace elektrod, galvanické články, uzance a principy zápisu, Nernstova rovnice, standardní redukční potenciál.
12. Základy povrchové chemie: povrchové napětí, Laplaceova-Youngova a Kelvinova rovnice, adsorpce z plynné fáze na pevném povrchu (fyzikální adsorpce a chemisorpce).

3. Chemické inženýrství (vychází z předmětů B409001 Chemické inženýrství I)

1. Materiálové bilance - bilanční veličiny a principy bilancování, bilanční systém, bilanční období, proud, složka, akumulace, zdroj, fiktivní proudy.
2. Laminární a turbulentní proudění, Reynoldsovo kritérium, rovnice kontinuity. Bernoulliova rovnice. Doprava kapalin v potrubí bez čerpadla a se zařazeným čerpadlem.
3. Filtrace - hmotnostní bilance filtrace. Rychlost filtrace a rovnice filtrace. Promývání při konstantním přetlaku. Základní typy filtrů.
4. Míchání kapalin, typy rotačních míchadel, příkonová charakteristika.
5. Sdílení tepla vedením a prouděním. Výpočet tepelného toku ve výměnících tepla a velikosti teplosměnné plochy výměníku.
6. Hmotnostní a entalpická bilance jednočlenné odparky, účinný teplotní rozdíl.
7. Sušení pevných látek. Látková a entalpická bilance kontinuální sušárny a kaloriferu. Bilance hmotnosti pro vsádkovou sušárnu. Výpočet doby sušení ve vsádkové sušárně.
8. Extrakce pro vzájemně nemísitelná rozpouštědla - grafické a numerické řešení opakované a protiproudé extrakce. Rovnovážný stupeň.
9. Principy mžikové a vsádkové destilace. Schéma a funkce zařízení pro kontinuální rektifikaci. Látková a entalpická bilance.
10. Chemické reaktory – popis a látková bilance pro vsádkový reaktor s promíchávanou kapalinou, ideálně promíchávaný průtočný reaktor, trubkový reaktor s pístovým tokem.

4. Inženýrská informatika (vychází z předmětů B445002 Matematické metody v inženýrství a B445007 Zpracování signálů)

1. Dvourozměrná a třírozměrná grafika v MATLABu. Strukturalizace dat v MATLABu. Manipulace s výrazy.
2. Aproximace funkcí, metoda nejmenších čtverců, algoritmy. Lineární a nelineární aproximace, gradientní metoda, vrstevnicové znázornění. Nelineární rovnice, základní algoritmy.
3. Počítačová grafika, rastrová a vektorová grafika, přehled grafických formátů. Barvy a jejich zpracování, barevné modely. Histogram. Pořízení obrazu v elektronické podobě. Základy geometrického modelování křivek a ploch, geometrické transformace obrazu.
4. Aplikace metod zpracování signálů. Definice a základní vlastnosti diskrétní Fourierovy transformace, spektrální analýza, základní typy číslíkových filtrů. Predikce časových řad.
5. Popis jednorozměrných a dvourozměrných dat, vzorkování a kvantování signálů. Statistické metody zpracování signálů, histogramy, korelace. Metody záznamu a zpracování reálných signálů a obrazů. Aplikace zpracování signálů a obrazů.

5. Počítače a programování v chemii (vychází z předmětů B445012 Počítačový sběr dat a B445013 Programovací techniky)

1. Základní desky, mikroprocesory, paměti, pevné disky a disková pole. Výměnná paměťová zařízení. Grafický subsystém a zobrazovací jednotky. Přídavné karty, komunikační rozhraní, vstupní a výstupní periferní zařízení.
2. Systém sběru dat, vzorkování signálu. Měřicí karta, připojení reálného zařízení, unifikované signály.
3. Filtrace signálu, dolnoproústň, hornoproústň a pásmové filtry. Číslíková filtrace.
4. Logické obvody, kombinační a sekvenční obvody. Čítače, časovače, registry.
5. Programovací jazyky. Datové typy, proměnné, konstanty, pole, výrazy a základní příkazy, příkazy pro řízení běhu programu. Vytváření a volání podprogramů. Objektově orientované programování.
6. Dynamické datové struktury jako objekty: pole, seznamy, stromy. Realizace algoritmů v reálném čase, multiprocesorové algoritmy. Realizace iteračních postupů: řešení nelineárních rovnic a jejich soustav.

6. Analytická chemie (vychází z předmětu Analytická chemie I)

1. Odměrná a vážková analýza (základní pojmy, rozdělení a principy titračních metod, bod ekvivalence a jeho indikace).
2. Potenciometrie, měření pH (typy elektrod, selektivita elektrod, přímá potenciometrie, potenciometrická titrace).
3. Elektrochemické metody s procházejícím proudem (voltametrie, polarografie, coulometrie).
4. Plynová a kapalinová chromatografie (přehled a principy jednotlivých technik, důležité veličiny, způsoby detekce, kvalitativní a kvantitativní analýza).
5. Lambertův-Beerův zákon a jeho využití (veličiny, odchylky od platnosti, aplikace).
6. Spektrometrická instrumentace (základní stavební jednotky přístrojů pro emisní, absorpční a fluorescenční spektrometrii).
7. Techniky atomové spektrometrie (přehled a principy jednotlivých technik).
8. Techniky molekulové spektrometrie (přehled a principy jednotlivých technik).
9. Hmotnostní spektrometrie (části hmotnostního spektrometru, techniky ionizace a separace iontů, aplikace v kvalitativní a kvantitativní analýze).