

Státní závěrečná zkouška studijního programu Analytická chemie

Organizace a průběh

Státní závěrečné zkoušky (dále jen SZZ) magisterského studijního programu Analytická chemie (N403) se řídí aktuálně platným Studijním a zkušebním řádem VŠCHT Praha a skládají se z obhajoby diplomové práce a ústní části.

Při obhajobě diplomové práce student přednese teze diplomové práce, vyjádří se k posudkům práce a diskutuje o své práci se členy zkušební komise. V ústní části SZZ se prověří znalosti studenta tím, že student odpovídá na otázky členů zkušební komise ze čtyř tematických okruhů v souladu se schválenou akreditací magisterského studijního programu.

Specializace: Analytická chemie a jakostní inženýrství (N403C)

Tematické okruhy povinné

TO1: Separační metody

TO2: Molekulová spektroskopie

TO3: Management jakosti a chemometrika

Tematické okruhy volitelné (povinně se volí jeden okruh)

TO4-1: Atomová spektrometrie

TO4-2: Elektroanalytické metody

TO4-3: Bioanalytické metody

Náplň tematických okruhů

TO1: Separační metody

(vychází z předmětu M402002 Pokročilé separační metody)

Rozdělení separačních metod, základní pojmy. Základní vztahy v chromatografii, principy. Plynová chromatografie – teorie, techniky, instrumentace. Kapalinová chromatografie-teorie, techniky, instrumentace. Superkritická fluidní chromatografie. Kapilární elektroforéza – základní pojmy a principy, teorie, techniky, instrumentace. Kapilární elektrochromatografie. Hmotnostní spektrometrie – základní pojmy, iontové zdroje, analyzátory, detektory.

TO2: Molekulová spektroskopie

(vychází z předmětu M402005 Molekulová spektroskopie)

Společný teoretický základ molekulové spektroskopie. Schrödingerova rovnice, Bornova-Oppenheimerova aproximace. Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení, Plankova rovnice. Einsteinova teorie spektrálních přechodů. Rovnice přenosu záření, Lambertův zákon a meze jeho platnosti. Beerův zákon v multikomponentní analýze. Principy experimentálních přístrojů. Klasické zdroje, lasery, proladitelné lasery (polovodičové, laser diferenční zdroje) Gunovy a Schottkyho diody, karcinotrony, klystrony,

násobiče a směšovače záření. Typy detektorů a optické materiály podle oblasti. Princip a typy FT spektrometrů.

Elektronová spektroskopie a chromofory, Franckův-Condonův princip, absorpce, fluorescence, fosforescence. HOMO, LUMO, výběrová pravidla. Vibrační spektroskopie (IR, NIR, THz, Raman), harmonický oscilátor, normální vibrace, symetrie normálních souřadnic. Vibrační kvantová čísla. Fundamentální, vyšší harmonické a kombinační přechody. Výběrová pravidla pro IR a Ramanovu spektroskopii. Charakteristické vibrace. Rotační spektroskopie. Molekula jako sférický, symetrický a asymetrický rotor, výběrová pravidla. Fotoelektronová spektroskopie (UPS, XPS, ESCA), chemický posun, aplikace. NMR, spiny jader a vznik rezonance s vnějším polem, chemický posun, intenzita a multiplicita signálů.

TO3: Management jakosti a chemometrika

(vychází z předmětu M402008 Analytická chemometrika, M402016 Vícerozměrné statistické metody, M402017 Systémy managementu jakosti, M402021 Metrologie v chemii)

Metrologie v chemii, metrologická návaznost, referenční materiály, jejich použití a příprava, nejistoty měření, porovnání s limitními hodnotami, způsoby odhadu nejistot měření u analytických stanovení, statistická regulace, zkoušení způsobilosti. Analytická instrumentace, validace, úloha mezinárodních organizací v oblasti kvality analytických měření. Náhodná veličina a její charakterizace, číselné charakteristiky rozdělení, normální rozdělení a jeho standardizace, náhodný výběr a jeho realizace, bodové a intervalové odhady parametrů základního souboru, testování hypotéz (chyba I. a II. druhu, síla testu, volba hypotézy), parametrické testy středních hodnot a rozptylů, vylučování odlehlých výsledků, neparametrické testy středních hodnot, analýza rozptylu (mnohonásobné porovnávání, Kruskalův-Wallisův test), faktoriální pokusy, optimalizace experimentu, kontingenční tabulky, regresní a korelační analýza, kalibrace analytické metody.

Předzpracování vícerozměrných dat, vícerozměrné průzkumné techniky, regresní metody, klasifikační metody, validace statistických metod.

TO4-1: Atomová spektrometrie

(vychází z předmětu M402001 Atomová spektrometrie)

Interakce atomů a molekul s elektromagnetickým zářením, šířka a intenzita spektrálních čar. Konstrukce monochromátorů a polychromátorů, rozlišovací schopnost. Detektory záření. Atomová absorpční spektroskopie (AAS): zdroje záření, atomizace v plameni a elektrotermická atomizace, interference a jejich korekce, generování hydridů, stanovení Hg, optimalizace a zpracování signálu. Atomová fluorescenční spektroskopie. Atomová emisní spektrometrie s buzením spekter plamenem, elektrickou jiskrou a obloukem, různými typy plazmatu, laserem a doutnavým výbojem: základní součásti přístrojů, interference a jejich korekce, možnosti aplikací. Rentgenová spektrální analýza, základní součásti přístrojů, tvar spekter, možnosti aplikací. Hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem: základní konstrukční prvky přístrojů, interference a jejich odstranění, možnosti aplikací včetně speciálních technik jako jsou laserová ablace a analýza nanočástic. Spřažené techniky, stopová prvková speciální analýza.

TO4-2: Elektroanalytické metody

(vychází z předmětu M402003 Elektroanalytické metody)

Teoretické základy: látkový transport (migrace a difúze), elektrolyt, elektroanalýza, potenciál, faradaické/nefaradaické děje, elektrická dvojrůzstva, elektrody, polarizace elektrod, přepětí, Nernstova rovnice pro různé typy elektrod (referenční a pracovní elektrody (kovové, membránové)), reverzibilní a irreverzibilní systémy, druhy proudů. Rozdělení elektroanalytických metod (klasifikace) a základní

instrumentace. Principy jednotlivých elektroanalytických metod: potenciometrie, voltametrie (lineární, cyklická, pulzní, rozpouštěcí), konduktometrie, coulometrie (potenciostatická / galvanostatická coulometrie, Faradayovy zákony, způsoby měření náboje, primární coulometrie, sekundární coulometrie), elektrochemická impedanční spektroskopie. Pracovní elektrody (membránové elektrody, tuhé elektrody, nanoelektrody): konstrukce, uspořádání, příprava, vlastnosti. Referentní a pomocné elektrody: konstrukce, význam. Přídavkové techniky v potenciometrii (metoda známého přídavku a snížení koncentrace vzorku). Elektrochemické senzory: příprava, vlastnosti, uspořádání, provedení experimentu, detekce iontů, bioanalytů, plynů, multikomponentní analýza (elektrodová pole). Elektrochemické detektory v průtokových a separačních metodách. Stanovení reálného vzorku: výběr metody, princip metody, podmínky stanovení, vyhodnocení kvantity a kvality, záznam získaný při stanovení vzorku (potravinářství, farmacie, medicína a forenzní analýza).

TO4-3: Bioanalytické metody

(vychází z předmětu M402023 Pokročilé bioanalytické metody)

Definice bioanalytických metod. Enzymy: kinetika a inhibice enzymových reakcí, enzymy jako analytická činidla, využití enzymových metod v praxi, laboratorní diagnostika. Principy imunochemických metod: antigeny, hapteny, protilátky. Charakterizace interakcí antigen-protilátka. Protilátky: polyklonální, monoklonální, rekombinantní, příprava, použití. Imunochemické metody a jejich rozdělení. Imunoprecipitační metody: precipitace v roztoku, aglutinace, pasivní aglutinace, využití. Citlivé imunochemické techniky (ELISA). Bioanalytické metody využívající radionuklidy: vhodné radionuklidy, poločasy rozpadu, metody detekce, značení protilátek. RIA, radiometrické metody, práce s radionuklidy. Imunohistochemie: postupy, značení histologických preparátů pomocí protilátek. Afinitní precipitace, imunoafinitní biosenzory, FACS. Hmotnostní spektrometrie biomolekul: iontové zdroje, analyzátoři, detektory. Kapalinová chromatografie pro separaci biomolekul včetně afinitní chromatografie. Proteomika: příprava vzorku, separační metody, identifikace mikroorganismů, identifikace a kvantifikace proteinů pomocí hmotnostní spektrometrie, analýza posttranslačních modifikací, bioinformatika, database. Elektroforetické metody: SDS elektroforéza, izoelektrická fokusace, 2D elektroforéza, western blot (imunoblot), barevná a chemiluminiscenční detekce, northern blot, Southern blot, imunoelektroforetické metody. Biochemické a mikrobiologické metody v analytice. Genetické metody: izolace DNA a RNA, polymerázová řetězová reakce (PCR), kvantitativní PCR, digitální PCR, stanovení primární sekvence DNA, detekce specifických sekvencí produktu *in situ*, biočipy. Detekční limity a použití vybraných bioanalytických metod.