

Popis předmětu

Zkratka předmětu:	KOANCH/C844	Strana:	1 / 2
Název předmětu:	Metody studia struktury látek I		
Akademický rok:	2023/2024	Tisknuto:	05.06.2024 13:22

Pracoviště / Zkratka	KOANCH / C844			Akademický rok	2023/2024
Název	Metody studia struktury látek I			Způsob zakončení	Zkouška
Akreditováno/Kredity	Ano, 5 Kred.			Forma zakončení	Kombinovaná
Rozsah hodin	Přednáška 3 [HOD/TYD] Seminář 1 [HOD/TYD]			Zápočet před zkouškou	NE
Obs/max	Statut A	Statut B	Statut C	Počítán do průměru	ANO
Letní semestr	3 / -	0 / -	0 / -	Min. (B+C) studentů	nestanoveno
Zimní semestr	0 / -	0 / -	0 / -	Opakovaný zápis	NE
Rozvrh	Ano			Vyučovaný semestr	Letní semestr
Vyučovací jazyk	Čeština			Počet dnů praxe	0
Volně zapisovatelný předmět	Ano				
Hodnotící stupnice	A B C D E F				
Počet hodin kontaktní	0				
Automat. uzn. záp. před zk.	Ne				
Periodicita	K				
Nahrazovaný předmět	Žádný				
Vyloučené předměty	Nejsou definovány				
Podmiňující předměty	Nejsou definovány				
Předměty informativně doporučené	Nejsou definovány				
Předměty, které předmět podmiňuje	Nejsou definovány				

Cíle předmětu (anotace):

Předmět "Metody studia struktury látek I" seznamuje studenty se základními metodami určenými pro zkoumání struktury látek. Jedná se o infračervenou a Ramanovu spektroskopii, elektronovou spektroskopii v UV-VIS-NIR oblasti, vybrané metody založené na interakci látky s magnetickým polem (magnetochemie, EPR a NMR pevné fáze) a termickou analýzu. Pro každou metodu je nejprve studentům představen teoretický základ dané experimentální techniky a poté následují praktická cvičení, ve kterých studenti samostatně získávají a zpracovávají data.

Požadavky na studenta

Obsah

1. týden: Úvod do vibrační spektroskopie. Dvouatomová molekula. Vliv hmotnosti na vlnočet vibrace. Vliv silové konstanty na vlnočet. Kvantový pohled-lineární harmonický oscilátor. Anharmonické vibrace. Výběrová pravidla harmonického oscilátoru. Výběrové pravidlo symetrie.
2. týden: Víceatomové molekuly. Trojatomové molekuly. Kombinační pásy. Koincidence Ramanových a IR spekter. Vibrační reprezentace. Algoritmus určení vibrační reprezentace pro libovolnou N-atomovou molekulu. Depolarizační faktor Ramanových spekter.
3. týden: Přiřazování fundamentálních vibrací, určení symetrie fundamentální vibrace, určení tvaru fundamentální vibrace. Vibrační spektra pevných látek. Korelační tabulka.
4. týden: Experimentální techniky měření infračervených spekter (transmise, reflexe, ATR). Vzhled spektra v závislosti na použité technice a skupenství vzorku. Rotačně-vibrační struktura IR pásu plynů. Měření IR a Ramanových spekter, interpretace a analýza (praktická cvičení). Izotopický efekt. Přiřazování charakteristických vibrací, vyhledávání v databázích spekter.
5. týden: Elektronová spektroskopie. Jednoelektronový systém-spektrum vodíkového atomu. Význam kvantových čísel u jedno a víceelektronového systému. Spektra víceelektronových atomů. Termy. Symboly a určování termů. Tříelektronový systém. Mikrostav.
6. týden: Ekvivalence elektronů a děr. Celková degenerace termu. Franck-Condonovy parametry. Intenzita čáry, spinové

výběrové pravidlo. Určení termu základního stavu, Hundova pravidla, Racahovy parametry.

7. týden: Interpretace elektronových spekter molekul. Elektronová spektra komplexů. Interligandové přechody. CT pásy.

Elektronové d-d přechody (pásy). Tanabeho-Suganovy diagramy. (ligandové pole v různých symetriích - štěpení d-orbitalů)

8. týden: Experimentální techniky měření elektronových spekter v UV-Vis-NIR oblasti. Elektronová spektra Oh a Td částic, určení 10Dq, B z experimentálních dat.

9. týden: Kalorimetrické a termoanalytické metody, teoretické základy.

10. týden: Kalorimetrické a termoanalytické metody, laboratorní cvičení.

11. týden: Elektronová paramagnetická rezonance, teoretické základy, laboratorní cvičení.

12. týden: NMR spektroskopie v tuhé fázi, teoretické základy, laboratorní cvičení.

13. týden: Magnetická susceptibilita, typy magnetického chování, magnetický moment, Bohrov magneton, spin-only formule, orbitální příspěvek. Způsoby měření (Gouyovy a Evansovy váhy, Evansova metoda NMR spektroskopie, SQUID). Měření magnetické susceptibilita vybraných sloučenin, určení počtu nepárových elektronů a oxidačního stavu centrálního atomu (praktická cvičení)

14. týden: Závěrečná písemná práce.

Předpoklady - další informace k podmíněnosti studia předmětu

Získané způsobilosti

Studijní opory

Garanti a vyučující

- **Garanti:** doc. Ing. Milan Erben, Ph.D.
- **Přednášející:** prof. Ing. Zdeněk Černošek, CSc. (35%), doc. Ing. Milan Erben, Ph.D. (50%), doc. RNDr. Jana Holubová, Ph.D. (15%)
- **Vede seminář:** doc. Ing. Eva Černošková, CSc. (10%), doc. Ing. Milan Erben, Ph.D. (60%), doc. RNDr. Jana Holubová, Ph.D. (30%)

Literatura

- **Základní:** Horák, Milan. *Infračervená spektra a struktura molekul : použití vibrační spektroskopie při určování struktury molekul*. Praha: Academia, 1976.
- **Základní:** Kolektiv autorů. *Metody charakterizace materiálů*. Univerzita Pardubice, 2012. ISBN 978-80-7395-521-2.
- **Základní:** J. Fišer. *Úvod do molekulové symetrie*. Praha, 1980.
- **Rozšiřující:** Nakamoto, Kazuo. *Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds..* Hoboken: John Wiley & Sons, 2009. ISBN 978-0-471-74339-2.
- **Rozšiřující:** Harris, Daniel C. *Symmetry and spectroscopy : an introduction to vibrational and electronic spectroscopy*. New York: Dover Publications, 1989. ISBN 978-0-486-66144-5.

Vyučovací metody

Monologická (výklad, přednáška, instruktáž)

Laborování

Hodnotící metody

Písemná zkouška

Předmět je zařazen do studijních programů:

Studijní program	Typ stud.	Forma stud.	Obor	Etapa	V.st.pl.	Rok	Blok	Statut	D.roč.	D.sem.
Anorganická a bioanorganická chemie	Navazující	Prezenční	Anorganická a bioanorganická chemie	1	2023	2023	povinné předměty	A	1	LS
Anorganická a bioanorganická chemie	Navazující	Prezenční	Anorganická a bioanorganická chemie	1	2022	2023	povinné předměty	A	1	LS