

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: Forenzní chemie (N403B)

Tematické okruhy povinné

TO1: Separační metody

TO2: Molekulová spektroskopie

TO3: Kriminalistika a právo

Tematické okruhy volitelné (povinně se volí jeden okruh)

TO4-1: Analytická chemometrika

TO4-2: Stopová analýza

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. Maxwelllovo-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: Kriminalistika a právo

(vychází z předmětu M402035 Teorie a metody kriminalistiky, M402029 Úvod od kriminalistické odorologie)

Teorie kriminalistických stop, pojetí kriminalistických stop, klasifikace. Teorie kriminalistické identifikace, druhy identifikace a způsoby identifikačního zkoumání. Metody zajišťování kriminalistických stop. Metody identifikace osob. Metody identifikace věcí. Neidentifikační zkoumání v kriminalistice. Základní způsoby kriminalisticko-technické dokumentace. Pojem trestný čin. Základní kriminalistickotechnické metody. Základní kriminalisticko-taktické metody.

TO4-1: Analytická chemometrika

(vychází z předmětu M402008 Analytická chemometrika, M402016 Vícerozměrné statistické metody)

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, nejistoty měření.

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

TO4-2: Stopová analýza

(vychází z předmětu M402027 Metody stopové a ultrastopové analýzy)

Historický vývoj metod stopové analýzy pro forenzní vědy. Klasifikace analytických metod a technik podle množství analytu ve vzorku, vymezení pojmů stopové a ultra-stopové analýzy, koncentrační rozsahy, jednotky koncentrací, používané předčíslicí, pracovní charakteristiky metod stopové analýzy. Obtížnosti spojené s dosažením spolehlivých výsledků a způsoby jejich řešení. Odběr reprezentativního vzorku pro stopovou analýzu. Stopová a ultra-stopová analýza anorganických analytů. Princip neutronové aktivační analýzy. Rentgenová fluorescenční spektroskopie ve forenzních vědách. Základní princip přístupu ke stopové a ultra-stopové analýze organických analytů (extrakční techniky). UV-Vis absorpční spektroskopie pro stopovou analýzu. Derivatizační postupy pro zvýšení citlivosti a selektivnosti stanovení. Fluorimetrie pro stopovou analýzu. Vlastní a nevlastní fluorofory. Imunologický test polarizované fluorescence (FPIA) pro stanovení mykotoxinů. Konstrukce biosensorů. Princip práce FRET biosensorů, fluorescenčních sond pro nukleové kyseliny, pH biosensorů. Tykadla hmyzu jako biosensory pro ultrastopové stanovení feromonů. Potenciometrické sensory pro stopovou analýzu. Metody molekulární spektroskopie pro stopovou analýzu. Možnosti zvýšení citlivosti infračervené spektroskopie pro stanovení analytů ve stopovém množství. Zvýšení citlivosti Ramanova rozptylu pro stanovení stopového množství analytu (RR, SERS).