



**Univerzita Karlova v Praze  
Fakulta přírodovědecká**

žádost o prodloužení akreditace

navazujícího magisterského studijního programu

**Chemie**

studijní obor

**Fyzikální chemie**

(prezenční forma, dvouletá standardní doba, výuka v českém jazyce)

žádost o udělení akreditace

navazujícího studijního programu

**Chemistry**

se studijním oborem

**Physical Chemistry**

(prezenční forma, dvouletá standardní doba, výuka v anglickém jazyce)

prosinec 2011

A – Žádost o akreditaci – základní evidenční údaje (bakalářské a magisterské SP)									
Vysoká škola	Univerzita Karlova v Praze								
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta						st. doba	titul	
Název studijního programu	Chemie	STUDPROG	N1407	2	Mgr.				
Původní název SP	Chemie	platnost předchozí akred.			do 15.8.2012				
Typ žádosti	<del>udělení akreditace</del>	prodloužení akreditace X	<del>rozšíření akreditace</del>	<del>o nový studijní obor</del>	<del>o formu studia</del>	<del>na instituci</del>			
Typ studijního programu	<del>bakalářský</del>	<del>magisterský</del>	navazující magisterský X		rigorózní řízení		KKOV		ISCED97
Forma studia	<del>prezenční</del>	<del>kombinovaná</del>	<del>distanční</del>		ano/ne	titul			
Název studijního oboru (původní název studijního oboru)	Fyzikální chemie				ANO	RNDr.	1404T001	442	
Jazyk výuky	český	Varianta studia	jednooborové	dvouoborové	jednooborové a dvouoborové				
Název studijního programu v anglickém jazyce	Chemistry								
Název studijního oboru v anglickém jazyce	Physical Chemistry								
Název studijního programu v českém jazyce									
Název studijního oboru v českém jazyce									
(Předpokládaný) počet přijímaných	3	Počet studentů k datu podání žádosti	9						
Garant studijního programu (návrh)	Prof. RNDr. Jiří Vohlídal, CSc.								
Garant studijního oboru Zpracovatel návrhu	Prof. RNDr. Karel Procházka, DrSc.								
Kontaktní osoba z fakulty	Dr. V. Bartůňková, 221951155, <a href="mailto:bartunk1@natur.cuni.cz">bartunk1@natur.cuni.cz</a>				Kontaktní osoba RUK	Kamila Klabalová, 224 491 264, <a href="mailto:kamila.klabalova@ruk.cuni.cz">kamila.klabalova@ruk.cuni.cz</a>			
Adresa www stránky	<a href="http://is.cuni.cz/akreditace/login.php">http://is.cuni.cz/akreditace/login.php</a>				přístupový login a heslo	login: <b>ak-prf</b> heslo: <b>sliswos</b>			
Projednání akademickými orgány	Projednáno AS fakulty	Schváleno VR fakulty	Projednáno KR	Projednáno VR UK					
Den projednání/schválení	16.6.2011	13.10.2011							
Podpis rektora					datum				

A – Žádost o akreditaci – základní evidenční údaje (bakalářské a magisterské SP)							
Vysoká škola	Univerzita Karlova v Praze						
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta					st. doba	titul
Název studijního programu	Chemistry	STUDPROG	N1407	2	Mgr.		
Původní název SP	Chemistry	platnost předchozí akred.		do 15.8.2012			
Typ žádosti	<b>X udělení akreditace</b>	<del>prodloužení akreditace</del>	<del>rozšíření akreditace</del>	<del>o nový studijní obor</del>	<del>o formu studia</del>	<del>na instituci</del>	
Typ studijního programu	<del>bakalářský</del>	<del>magisterský</del>	navazující magisterský X		rigorózní řízení		KKOV
Forma studia	prezenční	<del>kombinovaná</del>	<del>distanční</del>		ano/ne	titul	
Název studijního oboru (původní název studijního oboru)	Physical Chemistry (Výuka v AJ dosud akreditována pod českým SO Fyzikální chemie)				ANO	RNDr.	1404T001
							442
Jazyk výuky	anglický	Varianta studia	jednooborové	dvouoborové	jednooborové a dvouoborové		
Název studijního programu v anglickém jazyce							
Název studijního oboru v anglickém jazyce							
Název studijního programu v českém jazyce	Chemie						
Název studijního oboru v českém jazyce	Fyzikální chemie						
(Předpokládaný) počet přijímaných	3	Počet studentů k datu podání žádosti	0				
Garant studijního programu (návrh)	Prof. RNDr. Jiří Vohlídal, CSc.						
Garant studijního oboru Zpracovatel návrhu	Prof. RNDr. Karel Procházka, DrSc.						
Kontaktní osoba z fakulty	Dr. V. Bartůňková, 221951155, <a href="mailto:bartunk1@natur.cuni.cz">bartunk1@natur.cuni.cz</a>			Kontaktní osoba RUK		Kamila Klabalová, 224 491 264, <a href="mailto:kamila.klabalova@ruk.cuni.cz">kamila.klabalova@ruk.cuni.cz</a>	
Adresa www stránky	<a href="http://is.cuni.cz/akreditace/login.php">http://is.cuni.cz/akreditace/login.php</a>			přístupový login a heslo		login: <b>ak-prf</b> heslo: <b>sliswos</b>	
Projednáni akademickými orgány	Projednáno AS fakulty	Schváleno VR fakulty	Projednáno KR	Projednáno VR UK			
Den projednání/schválení	16.6.2011	13.10.2011					
Podpis rektora				datum			

<b>B – Akreditace studijního programu / oboru</b>	
Vysoká škola	Univerzita Karlova v Praze
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta
Název studijního programu	N1407 Chemie
Název studijního oboru	1404T001 Fyzikální chemie
Zaměření na přípravu k výkonu regulovaného povolání	NE
<b>Charakteristika oboru</b>	
<p>Studijní obor fyzikální chemie je zaměřen na výchovu odborníků vzdělaných jak v široké oblasti fyzikální chemie a v oborech příbuzných (chemická fyzika, fyzikální chemie polymerů, biofyzikální chemie, koloidní chemie), tak i v ostatních chemických disciplínách. Absolventi se seznámí s moderními trendy vývoje fyzikální chemie a získají přehled o důležitých multidisciplinárních vazbách. Podle zaměření diplomového projektu se stanou specialisty buď v teoretické chemii (kvantová chemie, statistická termodynamika, počítačová chemie a počítačové modelování) nebo v moderních experimentálních oblastech. Výchova se zaměřuje na přípravu odborníků pro práci jak v multidisciplinárních vědeckých a vývojových týmech tak i v průmyslu.</p>	
<b>Profil absolventa studijního oboru</b>	
<p>Absolvent studijního oboru fyzikální chemie je vybaven teoretickými znalostmi a experimentálními dovednostmi pokrývajícími všechny chemické obory a hlubokými znalostmi v oblasti fyzikální chemie. Má i hlubší znalosti v oblasti fyziky, matematiky a práce s výpočetní technikou. Protože fyzikálně chemické přístupy a metody jsou nedílnou součástí všech chemických i příbuzných oborů, nabízejí se absolventům široké možnosti uplatnění ve vědeckých týmech vysokých škol, výzkumných ústavu a výrobních subjektů s chemickým, biochemickým, fyzikálním, biofyzikálním, materiálovým, farmakologickým a lékařským zaměřením. Absolventi mohou rovněž nalézt uplatnění v marketingu chemikálií a přístrojů a dále v administrativě a v řídicích funkcích chemicky orientovaných institucí.</p>	
<b>Charakteristika změny od poslední akreditace</b>	
<p>Žádné změny (kromě stylistických) v charakteristice oboru, ani v profilu absolventa nenastaly. Došlo k drobným změnám studijních plánů. Jedna přednáška byla přesunuta z povinně volitelných do povinných, a několik dalších ze skupiny 1 do skupiny 2 a naopak. Mírně byly upraveny počty kreditů u některých studijních povinností. Nedošlo však k žádným zásadním změnám studijních plánů, ani ke změnám profilujících předmětů, ani ke změně státní závěrečné zkoušky,</p>	
<b>Adresa www stránky s původními charakteristikami předmětů /kontaktní osoba</b>	
<p><a href="http://www.natur.cuni.cz/fakulta/studium/studium-mgr/chemie/program-chemie">http://www.natur.cuni.cz/fakulta/studium/studium-mgr/chemie/program-chemie</a>  Prof. RNDr. Karel Procházka</p>	
<b>Informační a technické zabezpečení studijního programu</b>	
<p>Z hlediska zabezpečení studia jsou na Přírodovědecké fakultě UK k dispozici přiměřené prostory a technologické systémy odpovídající českému standardu ve sféře školství. Počítačová síť Přírodovědecké fakulty je připojena k síti PASNET rychlostí 1Gb/s.</p> <p>Fakulta má vybudován centrální informační systém. Správa a údržba počítačové sítě fakulty je zabezpečována centrálně specializovaným oddělením Centrum informačních technologií. Toto pracoviště zabezpečuje funkci a rozvoj informačních systémů fakulty, včetně www stránek fakulty (<a href="http://www.natur.cuni.cz">http://www.natur.cuni.cz</a>) v kontextu budování a rozvoje informačního systému UK v Praze.</p> <p>Na fakultě je plně funkční elektronický studijní informační systém, elektronické zápisy předmětů, evidence výsledků studijních povinností.</p> <p>V rámci RUK je vybudován centrální informační systém, zajišťující přístup na internet jak ve studovnách, knihovnách, tak i a v počítačových učebnách. K internetu je možné se připojit i prostřednictvím Wi-Fi sítě, která je provozována v rámci projektu Eduroam. Takto lze připojit i soukromé notebooky.</p> <p>V rámci domovské instituce přírodovědecké fakulty je k dispozici celkem šest počítačových učeben (celkem 190 počítačů). Na počítačových učebnách a studovnách je k dispozici základní SW vybavení, jako je MS Office, internetový prohlížeč, správce souborů, program pro čtení PDF dokumentů atd. Některé učebny jsou provozovány již ve virtualizovaném prostředí, kdy je možno připravit konkrétní SW vybavení pro daný předmět dle požadavku vyučujících.</p> <p>Pro potřeby fakulty a studentů je k dispozici specializované multimediální pracoviště pro zpracování obrazu, fotek a videa. Každý student má pro svou práci po dobu studia vyhrazeno místo na síťovém diskovém úložišti fakulty, kde je zajištěno zálohování a obnova dat.</p> <p>Ze všech pracovišť na studovnách nebo učebnách lze požadovaný obsah vytisknout jak černobíle, tak na vybraných pracovištích i barevně. Tisk je samoobslužný, realizovaný pomocí dobíjecích karet.</p> <p>Základní support a podporu studentům a učebnách je zajištěna stálou službou z řad studentů. Obdobně je zjištěn servis pro učebny PŘF UK, které jsou provozované CIT.</p>	

Každý student má v rámci svého účtu, který mu byl založen, založenou e-mailovou schránku. E-mailová adresa je ve formátu [UKlogin@natur.cuni.cz](mailto:UKlogin@natur.cuni.cz). Schránka je přístupná jak z lokálních pracovišť (studovna, učebna) fakulty, tak i vzdáleně prostřednictvím webového rozhraní.

V současnosti je na fakultě studijní agenda, včetně doktorského studia, hodnocení studentů a řada studijních materiálů k dispozici prostřednictvím počítačové sítě, nebo intranetových portálů fakulty.

Na fakultě je k dispozici celkem 7 sekčních knihoven rozdělených podle oborů (biologická, botanická, chemická, geologická, geografická a knihovny Ústavu pro životní prostředí a katedry filosofie a dějin přírodních věd). Součástí všech knihoven je studovna. Dále jsou k dispozici dílčí knihovny na jednotlivých katedrách a ústavech. Dohromady nabízí tyto knihovny přes 600 000 svazků.

Základní odborné zaměření knižního fondu fakulty je na univerzální knihovní a informační fond s tematickým profilem zaměřeným na přírodní vědy a vzdělávání v přírodních vědách; dále pak na matematiku, informační technologie, filosofii, sociologii, management a další v souladu s akreditovanými studijními obory vyučovanými na fakultě. Knihovny jsou přístupné 5x týdně, každá v dopoledních a ty rozsáhlejší i v odpoledních hodinách.

Kromě tištěných knižních i časopiseckých publikací je součástí informačního systému rozsáhlá databáze odborných publikací a časopisů, dostupná studentům v elektronické podobě. Jejím správcem je Středisko vědeckých informací (<http://lib.natur.cuni.cz/BIBLIO/>) Nabízené servisní knihovnické služby: výpůjční včetně MMVS, elektronické on-line, informační a poradenské, rešeršní, propagační, reprografické – skener, tiskárna, kopírka

<b>Ba – Profil absolventa pro dodatek k diplomu</b>	
<b>Vysoká škola</b>	Univerzita Karlova v Praze
<b>Součást vysoké školy</b>	Přírodovědecká fakulta
<b>Název studijního programu</b>	Chemie
<b>Název studijního oboru</b>	Fyzikální chemie
<b>Profil absolventa pro dodatek k diplomu – český jazyk</b>	
<p>Absolvent studijního oboru fyzikální chemie je vybaven teoretickými znalostmi a experimentálními dovednostmi pokrývajícími všechny chemické obory a hlubokými znalostmi v oblasti fyzikální chemie. Má i hlubší znalosti v oblasti fyziky, matematiky a práce s výpočetní technikou. Protože fyzikálně chemické přístupy a metody jsou nedílnou součástí všech chemických i příbuzných oborů, nabízejí se absolventům široké možnosti uplatnění ve vědeckých týmech vysokých škol, výzkumných ústavů a výrobních subjektů s chemickým, biochemickým, fyzikálním, biofyzikálním, materiálovým, farmakologickým a lékařským zaměřením. Absolventi mohou rovněž nalézt uplatnění v marketingu chemikálií a přístrojů a dále v administrativě a v řídicích funkcích chemicky orientovaných institucí.</p>	
<b>Profil absolventa pro dodatek k diplomu – anglický jazyk</b>	
<p>The graduate has theoretical knowledge and experimental skills in all branches of chemistry and a deep knowledge in the physical chemistry. He/she has also a good education in physics and mathematics and is experienced in working with computers, scientific literature and databases. As the physico-chemical methodology and experimental techniques are used in all branches of chemistry, graduates are supposed to find a position in academic as well as industrial research teams in various fields of chemistry, biochemistry, material science and engineering, pharmacology, medicine, ecology, etc. He/she can also find a position in marketing of chemical products and chemistry-related instrumentation and further in the management of chemistry-oriented institutions.</p>	
<b>Profil absolventa pro dodatek k diplomu - další cizí jazyk</b>	
<b>Charakteristika oboru – český jazyk</b>	
<p>Studijní obor fyzikální chemie je zaměřen na výchovu odborníků vzdělaných jak v široké oblasti fyzikální chemie a v oborech příbuzných (chemická fyzika, fyzikální chemie polymerů, biofyzikální chemie, koloidní chemie), tak i v ostatních chemických disciplínách. Absolventi se seznámí s moderními trendy vývoje fyzikální chemie a získají přehled o důležitých multidisciplinárních vazbách. Podle zaměření diplomového projektu se stanou specialisty buď v teoretické chemii (kvantová chemie, statistická termodynamika, počítačová chemie a počítačové modelování) nebo v moderních experimentálních oblastech. Výchova se zaměřuje na přípravu odborníků pro práci jak v multidisciplinárních vědeckých a vývojových týmech tak i v průmyslu.</p>	
<b>Charakteristika oboru – anglický jazyk</b>	
<p>The study field Physical Chemistry is focused on training of experts educated both in a broad field of physical chemistry and in related fields (chemical physics, physical chemistry of polymers, biophysical and colloidal chemistry), and in all other chemical disciplines. The graduates acquire knowledge of the up-to-date trends in physical chemistry and get an overview on important interdisciplinary relationships. Depending on the specialization of diploma thesis, they become experts either in theoretical chemistry (quantum chemistry, statistical thermodynamics, computational chemistry and computer modeling), or in modern experimental fields. The study is aimed at the preparation of experts for the work both in multidisciplinary research and development teams and in industry.</p>	
<b>Profil absolventa – český jazyk</b>	
<p>Absolvent studijního oboru fyzikální chemie je vybaven teoretickými znalostmi a experimentálními dovednostmi pokrývajícími všechny chemické obory a hlubokými znalostmi v oblasti fyzikální chemie. Má i hlubší znalosti v oblasti fyziky, matematiky a práce s výpočetní technikou. Protože fyzikálně chemické metody a metodiky jsou nedílnou součástí všech chemických i příbuzných oborů, nabízejí se absolventům široké možnosti uplatnění ve vědeckých týmech vysokých škol a pracovních týmech výzkumných a vývojových ústavů a výrobních subjektů s chemickým, biochemickým, fyzikálním, biofyzikálním, materiálovým, farmakologickým a lékařským zaměřením. Absolventi mohou rovněž nalézt uplatnění v marketingu chemikálií a přístrojů a dále v administrativě a v řídicích funkcích chemicky orientovaných institucí</p>	
<b>Profil absolventa - anglický jazyk</b>	
<p>The graduate has theoretical knowledge and experimental skills in all branches of chemistry and a deep knowledge in the physical chemistry. He/she also has a good education in physics and mathematics and is experienced in working with computers, scientific literature and databases. As the physico-chemical methodology and experimental techniques are used in all branches of chemistry, graduates are supposed to find a position in academic as well as industrial research teams in various fields of chemistry, biochemistry, material science and engineering, pharmacology, medicine, ecology, etc. He/she can also find a position in marketing of chemical products and chemistry-related instrumentation and further in the management of chemistry-oriented institutions.</p>	

<b>C – Pravidla pro vytváření studijních plánů a státní závěrečná zkouška</b>							
<b>Vysoká škola</b>		Univerzita Karlova v Praze					
<b>Součást vysoké školy</b>		Přírodovědecká fakulta					
<b>Název studijního programu</b>		N1407 Chemie					
<b>Název studijního oboru</b>		1404T001 Fyzikální chemie					
Č.	Název předmětu	rozsah	způsob zak.	druh před.	kred.	vyučující	dopor. úsek st.
<b>Předměty povinné</b>							
MC260P10	Molekulová struktura a spektroskopie	2/1	Zk	P	4	Uhlík, F.	1 ZS
MC260S27	Experimentální metody fyzikální a makromolekulární chemie I	2/3	Z	P	6	Štěpánek, M.	1 ZS
MC260S46A	Seminář (A)	0/2	Z	P	1	Nachtigall, P.	1 ZS
MC260DP4A	Diplomový projekt (A)	0/6	Z	P	6	vedoucí diplomového projektu	1 ZS
MC260S28	Experimentální metody fyzikální a makromolekulární chemie II	2/3	Z	P	6	Sedláček, J.	1 LS
MC260S46B	Seminář (B)	0/2	Z	P	1	Nachtigall, P.	1 LS
MC260DP4B	Diplomový projekt (B)	0/10	Z	P	10	vedoucí diplomového projektu	1 LS
MC260C29	Pokročilé praktikum z fyzikální chemie	0/2		P	5	Štěpánek, M.	1 LS
MC260S58A	Seminář (C)	0/2	Z	P	1	Nachtigall, P.	2 ZS
MC260DP5A	Diplomový projekt (C)	0/18	Z	P	22	vedoucí diplomového projektu	2 ZS
MC260P105	Statistická termodynamika	2/0	Zk	P	3	Nachtigall, P.	2 ZS
MC260DP5B	Diplomový projekt (D)	0/26	Z	P	28	vedoucí diplomového projektu	2 LS
<b>Celkem kreditů za povinné předměty</b>					93		
<b>Předměty povinně volitelné</b>							
<b>skupina 1</b>							
MC260P14	Vibrační spektroskopie	2/1	Zk	PV1	4	Vlčková, B.	LS
MC260P05	Fotochemie	2/0	Zk	PV1	3	Fišer, J., Procházka, K.	ZS
MC260P79	Metody molekulové dynamiky a Monte Carlo	2/0	Zk	PV1	3	Jungwirth, P., Roeselová, M.	ZS
MC260P89	Programování v prostředí Matlab	1/2	Zk	PV1	3	Bludský, O.	ZS
MC260P59	Kvantová chemie	2/1	Zk	PV1	3	Nachtigall, P.	ZS
MC260P25	Základy programování I	2/1	Zk	PV1	4	Uhlík, F.	LS
MC270P06B	Spektrální metody NMR I	2/1	Zk	PV1	4	Dračínský, M.	ZS
MC260P11N	Chemická struktura	4/2	Zk	PV1	6	Fišer, J., Čárský, P.	ZS
MC260P08	Molekulová symetrie	2/1	Zk	PV1	3	Fišer, J.,	LS
<b>minimální počet kreditů ze skupiny 1</b>					8		
<b>skupina 2</b>							
MC260P78	Makromolekulární chemie II	3/2	Z+Zk	PV2	6	Vohlídal, J.	ZS
MC260P44	Biofyzikální chemie I	3/2	Zk	PV2	6	Obšil, T.	ZS
MC260P45	Biofyzikální chemie II	2/1	Zk	PV2	4	Obšil, T.	LS
MC260P46	Biomakromolekulární chemie	2/1	Zk	PV2	4	Rypáček, F.	LS
MC260P07	Elektromigrační separační procesy	2/1	Zk	PV2	4	Gaš, B.	ZS
MC240T37	Exkurze	1/0	Z	PV2	1	Havlíček, D.	LS
MC260P107	Techniky NMR spektroskopie	3/0	Zk	PV2	4	Tošner, Z.	LS
MC260P30	Fyzikální chemie makromolekul	3/0	Zk	PV2	4	Procházka, K.	LS
MC260P111	Nanochemie	3/0	Zk	PV2	4	Matějčík, P.	LS
<b>minimální počet kreditů ze skupiny 2</b>					7		

<b>Pravidla pro vytváření studijních plánů na UK</b>	Studium probíhá podle celouniverzitního kreditního systému, který je v souladu s pravidly European Credit Transfer System (ECTS) Povinně volitelné předměty jsou ve studijním plánu organizovány do jedné či více skupin; student volí povinně volitelné předměty na základě stanoveného minimálního počtu kreditů v každé skupině. Počet kreditů za povinné spolu s minimálním počtem kreditů za povinně volitelné předměty nesmí činit více než 90% (95%) celkového počtu kreditů. Ostatní předměty vyučované na UK se pro daný studijní obor považují za předměty volitelné, jejichž výběr může být studentovi doporučen (doporučené volitelné předměty).
<b>Organizace studia – na fakultě</b>	Úsekem studia je ročník
<b>Státní závěrečná zkouška</b>	
<b>Část SZZ1</b>	Obhajoba diplomové práce
<b>Část SZZ2</b>	Fyzikální chemie skládá se ze 3 tématických okruhů (TO): <b>TO1:</b> Fyzikální chemie <b>TO2, TO3:</b> z následující nabídky student vybírá dva tématické okruhy: Chemická fyzika, Biofyzikální chemie, Biochemie, Makromolekulární chemie, Analytická chemie, Anorganická chemie a Organická chemie
<b>Část SZZ3</b>	
<b>Část SZZ4</b>	
<b>Obhájené práce</b>	
Přístup ke zveřejněným diplomovým pracím je uveden na následující webovské adrese: <a href="https://is.cuni.cz/studium/dipl_st/index.php?fak=11310&amp;ustav=31-260&amp;druh_studia=N&amp;dobor=&amp;vedouci=&amp;stupr=1404&amp;fulltext=&amp;fulltext_kde%5B%5D=nazev&amp;skr=&amp;skr_obhajeni=&amp;dtyp=D&amp;kterep=obh&amp;pocet=50&amp;f=find&amp;do=main">https://is.cuni.cz/studium/dipl_st/index.php?fak=11310&amp;ustav=31-260&amp;druh_studia=N&amp;dobor=&amp;vedouci=&amp;stupr=1404&amp;fulltext=&amp;fulltext_kde%5B%5D=nazev&amp;skr=&amp;skr_obhajeni=&amp;dtyp=D&amp;kterep=obh&amp;pocet=50&amp;f=find&amp;do=main</a>	
<b>Příklady témat obhájených prací</b>	
<ol style="list-style-type: none"> <li>1) Modelování struktury vazebného místa lidského MT2 melatoninového receptoru</li> <li>2) Vícerozměrná simulace elektromigrace</li> <li>3) Katalytická příprava polyanilinů a polythiofenů</li> <li>4) Studium interakcí C-konce DNA vazebné domény proteinu AFX (FoxO4) s DNA</li> <li>5) Výpočty stavově specifickou multireferenční Brillouin- Wignerovou metodou vázaných klastrů</li> <li>6) Mezimolekulové interakce v pevných fullerech</li> <li>7) Příprava, charakterizace a SERS spektra poly(ethynylpyridin)ů a jejich solí</li> <li>8) Nanočástice poly(<math>\epsilon</math>-kaprolakton)-u-block-poly (ethylenoxid)u studované pomocí rozptylu světla a fluorescence</li> <li>9) Teoretické studium molekulového dikationtu <math>\text{NO}_2^+</math></li> <li>10) Elektroforetická separace normální a mutantní DNA za podmínek částečné denaturace</li> <li>11) Multivrstevné soubory bílkovin určené pro tkáňové inženýrství</li> <li>12) Výpočet vyšších viriálních koeficientů v modelových systémech bez přitažlivých sil</li> <li>13) Vliv micel na systémové eigenmobility v kapilární elektroforéze</li> <li>14) Molecular dynamics simulation of fluorescence anisotropy from labeled polyelectrolyte chains</li> <li>15) Simulace molekulové dynamiky na rozhraních kapalina/vzduch</li> <li>16) Studium interakcí mezi DNA vazebnou doménou forkhead transkripčního faktoru FoxO4 a 14-3-3 proteinem</li> </ol>	
<b>Obsah přijímací zkoušky a další požadavky na přijetí</b>	
Zájem o obor a dostatečné znalosti chemických a příbuzných oborů	
<b>Návaznost s dalšími stud. Programy</b>	
Návaznost na bakalářské studium: Tento magisterský studijní obor je vhodný zejména pro absolventy bakalářského studia s chemickým zaměřením, tedy např. absolventy bakalářských studijních programů Chemie, Biochemie či Klinická a toxikologická analýza.	
Návaznost na doktorské studium: Absolventi tohoto magisterského studijního oboru mohou dále pokračovat ve studiu v rámci doktorských studijních programů s chemickým zaměřením, např. Fyzikální chemie, Biochemie či Makromolekulární chemie	



<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
Název studijního předmětu	Molekulová struktura a spektroskopie			č. MC260P10
Typ předmětu	P		Dopor. ročník / semestr	1 ZS
Rozsah studijního předmětu	45	hod. za týden	2/1	kreditů 4
Jiný způsob vyjádření rozsahu				Počet semestrů 1 X 2
Způsob zakončení	Zk		Forma výuky	přednáška/cvičení
Další požadavky na studenta				
Vyučující	RNDr. Filip Uhlík, Ph.D.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>	<p>Přednáška je zaměřena na základní principy teorie molekulové spektroskopie. Důraz je kladen zejména na objasnění struktury energetických hladin, výběrová pravidla a interpretaci spekter MW, IR a NMR pomocí kvantové mechaniky. Součástí kurzu je i podrobnější rozbor variační a poruchové metody, Bornovy-Oppenheimerovy aproximace a časově závislé poruchové teorie. Problémy jako řešení 1-rozměrné Schroedingerovy rovnice (nestacionární i stacionární), harmonického vibračního problému a NMR spekter je ilustrován včetně metod pro numerické řešení na počítači. Předpokládá se, že student je obeznámen se základními pojmy kvantové mechaniky a chemické struktury.</p>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>	<p>P.W. Atkins: Molecular Quantum Mechanics. OUP, 1994.</p>			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>	<p>P.F. Bernath: Spectra of Atoms and Molecules. OUP, 1995.  I.N. Levine: Molecular Spectroscopy. Wiley, 1975.  J.D. Graybeal: Molecular Spectroscopy. McGraw-Hill, 1988.</p>			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
Rozsah konzultací (soustředění)				celkem hodin kontaktní výuky
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Experimentální metody fyzikální a makromolekulární chemie I</b>			č. MC260 S27
<b>Typ předmětu</b>	P		<b>Dopor. ročník / semestr</b>	4ZS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	75	<b>hod. za týden</b>	2/3	<b>kreditů</b> 6
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>			<b>Počet semestrů</b>	1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	zápočet		<b>Forma výuky</b>	předn./seminář
<b>Další požadavky na studenta</b>				
<b>Vyučující</b>	RNDr. Miroslav Štěpánek, PhD.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. Týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p><i>Anotace:</i>  Soubor vybraných úloh založených na využití moderních metod fyzikální chemie. Ve spolupráci se specialisty z Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie AVČR - pokud na fakultě není k dispozici příslušné přístrojové vybavení - se posluchači během zimního semestru ve čtvrtém ročníku seznámí formou praktického cvičení přímo na pracovišti příslušného ústavu s principem vybrané metody. Kurs pokračuje v letním semestru - C260S28.  V průběhu semestru absolvují posluchači následující úlohy: fotoelektronová spektroskopie povrchů pevných látek (AV), řádkovací elektronová mikroskopie (AV), laserová kinetická spektroskopie (AV), časově rozlišená fluorescenční spektroskopie (PřFUK), kvadrupólová hmotnostní spektroskopie (AV), polarografie (AV), diferenciální kapacita elektrodové dvojvrstvy a adsorpce organických látek (AV), EPR spektroskopie (AV) a fluorescenční korelační spektroskopie (AV)</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
Návody k úlohám jsou k dispozici na adrese <a href="http://lynette.natur.cuni.cz/stepanek/vyuka">lynette.natur.cuni.cz/stepanek/vyuka</a>				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>		<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>		
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Seminář (A)</b>			<b>č.</b> MC260S46A
<b>Typ předmětu</b>	P		<b>Dopor. ročník / semestr</b>	1 ZS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	30	<b>hod. za týden</b>	0/2	<b>kreditů</b> 1
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>			<b>Počet semestrů</b>	1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Z		<b>Forma výuky</b>	seminář
<b>Další požadavky na studenta</b>				
<b>Vyučující</b>	Doc.RNDr. Petr Nachtigall Ph.D.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>	<p>Jedná se o otevřenou formu výuky formou veřejně přístupného semináře katedry fyzikální a makromolekulární chemie. Na semináři pravidelně referují studenti magisterského a postgraduálního studia o průběhu a výsledcích svých diplomových, resp. disertačních prací, pracovníci katedry o svém výzkumu a přední čeští i zahraniční odborníci o nejnovějším vývoji v chemii. Seminářů se zúčastňují studenti, pracovníci katedry a hosté.</p> <p>Program semináře na každý semestr vypracuje tajemník katedry. Účast na semináři je pro studenty povinná v 1ZS (A), 1LS (B) a 2ZS (C).</p>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>	není nutná			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>			<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
Název studijního předmětu	Diplomový projekt (A)			č. MC260DP4A
Typ předmětu	P		Dopor. ročník / semestr	1 ZS
Rozsah studijního předmětu	90	hod. za týden	0/6	kreditů 6
Jiný způsob vyjádření rozsahu			Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Z		Forma výuky	samostatná práce
Další požadavky na studenta				
Vyučující	Vedoucí diplomového projektu, popř. další vedoucí-konzultant - podle tématu projektu.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>V 1 ZS se jedná o přípravu a zahájení diplomového projektu, což zahrnuje prostudování specializované literatury, provedení literární rešerše a její vyhodnocení, naplánování experimentální či teoretické činnosti a provedení základních (orientačních) experimentů či předběžných studií. Výsledkem této první etapy má být zhodnocení schůdnosti navrženého postupu řešení a jasný plán prací na další období.</p> <p>Diplomový projekt studenti řeší po celou dobu studia, přičemž hodinová dotace i počty kreditů postupně narůstají; 1ZS (A): 6 hod., 6 kr., 1LS (B): 10 hod., 10 kr., 2ZS (C): 18 hod., 22 kr. a 2LS (D): 26 hod., 28 kr. Výsledkem diplomového projektu je diplomová práce, jejíž obhajoba je součástí státní závěrečné zkoušky. V diplomové práci studenti popíší stav poznání v dané oblasti, formulují cíl projektu, popíší postup vlastních výzkumných prací a dosažené výsledky, které kriticky zhodnotí, popř. porovnají s již uveřejněnými podobnými výsledky jiných autorů.</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
Podle tématu diplomového projektu: základní monografie dané disciplíny a originální vědecké články (zejména nově publikované práce v prestižních časopisech)				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky		
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
Název studijního předmětu	Experimentální metody fyzikální a makromolekulární chemie II			č. MC260S28
Typ předmětu	P		Dopor. ročník / semestr	1 LS
Rozsah studijního předmětu	75	hod. za týden	2/3	kreditů 6
Jiný způsob vyjádření rozsahu				Počet semestrů 1 X 2
Způsob zakončení	Z		Forma výuky	Přednáška/ cvičení
Další požadavky na studenta				
Vyučující	doc. RNDr. Jan Sedláček Dr.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>Soubor vybraných úloh cílených na seznámení se s moderními metodami makromolekulární chemie. Ve spolupráci se specialisty z Ústavu makromolekulární chemie AVČR (pokud příslušné přístrojové vybavení není k dispozici na fakultě) se posluchači během letního semestru ve čtvrtém ročníku seznámí formou dvouhodinové úvodní přednášky a následujícího praktického cvičení přímo na příslušném pracovišti s principem vybrané metody, v některých případech se pak pokusí s použitím této metody vyřešit jednoduchý zadaný úkol. Kurs navazuje na C260S27.</p> <p>V průběhu semestru absolvují posluchači následující úlohy:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Charakterizace polymerního vzorku metodou statického a dynamického rozptylu světla (PřFUK)</li> <li>2. Charakterizace polymerního vzorku metodou SEC/MALS (PřFUK)</li> <li>3. Spektroskopická charakterizace polymerních vzorků (PřFUK)</li> <li>4. Charakterizace polymerních vzorků metodou SEC/DAD (PřFUK)</li> <li>5. Charakterizace polymerů mikroskopickými technikami (ÚMCH AV ČR)</li> <li>6. Charakterizace polymerů rentgenovou difrakcí (ÚMCH AV ČR)</li> <li>7. Studium molekulárních polymerních vrstev (ÚMCH AV ČR)</li> <li>8. Exkurse na vybraných pracovištích ÚMCH AV ČR</li> </ol>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
Ke každé úloze existuje úvodní text shrnující základní teoretická východiska, která se k danému tématu vztahují. Tyto materiály jsou k dispozici u vedoucího cvičení. (Doc. J. Sedláček).				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
Rozsah konzultací (soustředění)			celkem hodin kontaktní výuky	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Seminář (B)</b>			<b>č.</b> MC260S46B
<b>Typ předmětu</b>	P		<b>Dopor. ročník / semestr</b>	1 LS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	30	<b>hod. za týden</b>	0/2	<b>kreditů</b> 1
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>			<b>Počet semestrů</b>	1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Z		<b>Forma výuky</b>	seminář
<b>Další požadavky na studenta</b>				
<b>Vyučující</b>	Doc.RNDr. Petr Nachtigall Ph.D.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>Jedná se o otevřenou formu výuky formou veřejně přístupného semináře katedry fyzikální a makromolekulární chemie. Na semináři pravidelně referují studenti magisterského a postgraduálního studia o průběhu a výsledcích svých diplomových, resp. disertačních prací, pracovníci katedry o svém výzkumu a přední čeští i zahraniční odborníci o nejnovějším vývoji v chemii. Seminářů se zúčastňují studenti, pracovníci katedry a hosté.</p> <p>Program semináře na každý semestr vypracuje tajemník katedry. Účast na semináři je pro studenty povinná v 1ZS (A), 1LS (B) a 2ZS (C).</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
není nutná				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>		<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>		
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
Název studijního předmětu	Seminář (C)			č. MC260S58A
Typ předmětu	P		Dopor. ročník / semestr	2 LS
Rozsah studijního předmětu	30	hod. za týden	0/2	kreditů 1
Jiný způsob vyjádření rozsahu			Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Z		Forma výuky	seminář
Další požadavky na studenta				
Vyučující	Doc.RNDr. Petr Nachtigall Ph.D.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>Jedná se o otevřenou formu výuky formou veřejně přístupného semináře katedry fyzikální a makromolekulární chemie. Na semináři pravidelně referují studenti magisterského a postgraduálního studia o průběhu a výsledcích svých diplomových, resp. disertačních prací, pracovníci katedry o svém výzkumu a přední čeští i zahraniční odborníci o nejnovějším vývoji v chemii. Seminářů se zúčastňují studenti, pracovníci katedry a hosté.</p> <p>Program semináře na každý semestr vypracuje tajemník katedry. Účast na semináři je pro studenty povinná v 1ZS (A), 1LS (B) a 2ZS (C).</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
není nutná				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky		
Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>						
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Diplomový projekt (B)</b>				č.	<b>MC260DP4B</b>
<b>Typ předmětu</b>	P			<b>Dopor. ročník / semestr</b>	1 LS	
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	150	<b>hod. za týden</b>	0/10	<b>kreditů</b>	10	
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>				<b>Počet semestrů</b>	1 X	2
<b>Způsob zakončení</b>	Z			<b>Forma výuky</b>	samostatná práce	
<b>Další požadavky na studenta</b>						
<b>Vyučující</b>	Vedoucí diplomového projektu popř. další vedoucí-konzultant - podle tématu diplomového projektu.					
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>						
<p>Dokončení základní literární rešerše a průběžné sledování nejnovějších publikací. Zahájení experimentálních či teoretických prací (popř. počítačového modelování) dle vytvořeného plánu. Systematická výzkumná práce v těsné interakci s vedoucími diplomového projektu, konzultace dosažených výsledků. Příprava referátu a jeho přednes na semináři katedry.</p> <p>Diplomový projekt studenti řeší po celou dobu studia, přičemž hodinová dotace i počty kreditů postupně narůstají; 1ZS (A): 6 hod., 6 kr., 1LS (B): 10 hod., 10 kr., 2ZS (C): 18 hod., 22 kr. a 2LS (D): 26 hod., 28 kr. Výsledkem diplomového projektu je diplomová práce, jejíž obhajoba je součástí státní závěrečné zkoušky. V diplomové práci studenti popíší stav poznání v dané oblasti, formulují cíl projektu, popíší postup vlastních výzkumných prací a dosažené výsledky, které kriticky zhodnotí, popř. porovnájí s již uveřejněnými podobnými výsledky jiných autorů.</p>						
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>						
Literatura vztahující se k tématu diplomového projektu.						
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>						
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>						
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>			<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>			
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>						



<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Pokročilé praktikum z fyzikální chemie</b>			č. MC260C29
<b>Typ předmětu</b>	PV		<b>Dopor. ročník / semestr</b>	1LS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	30	<b>hod. za týden</b>	0/2	<b>kreditů</b> 5
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>				<b>Počet semestrů</b> 1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	zápočet		<b>Forma výuky</b>	cvičení
<b>Další požadavky na studenta</b>				
<b>Vyučující</b>	RNDr. Miroslav Štěpánek, PhD.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>	<p><i>Anotace:</i>  Pokročilé cvičení navazuje na základní cvičení z fyzikální chemie (C260C45) a obsahuje soubor dalších několika experimentálních úloh ilustrujících vybraná témata z přednášky Fyzikální chemie I, II (C260P01, C260P02). Úlohy: Vysokúčinná kapalinová chromatografie, gelová permeační chromatografie, kapilární zónová elektroforéza, rozptyl světla, viskozimetrie, stacionární fluorescenční spektroskopie</p>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>	Návody k úlohám jsou k dispozici na adrese <a href="http://lynette.natur.cuni.cz/stepanek/vyuka">lynette.natur.cuni.cz/stepanek/vyuka</a>			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>				<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Diplomový projekt (C)</b>			č. <b>MC260DP5A</b>
<b>Typ předmětu</b>	P		<b>Dopor. ročník / semestr</b>	2 ZS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	270	<b>hod. za týden</b>	0/18	<b>kreditů</b> 22
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>				<b>Počet semestrů</b> 1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Z		<b>Forma výuky</b>	samostatná práce
<b>Další požadavky na studenta</b>				
<b>Vyučující</b>	Vedoucí diplomového projektu popř. další vedoucí-konzultant - podle tématu diplomového projektu.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>Systematická vědecko-výzkumná činnost pod dohledem vedoucího diplomového projektu (intenzivní práce - vzhledem k hodinové dotaci i počtu kreditů), průběžné sledování literatury dané oblasti, pravidelné vyhodnocování výsledků a jejich konzultace s vedoucím diplomového projektu. Příprava a prezentace referátu na semináři katedry. V tomto stadiu diplomového projektu jsou možné menší modifikace cílů i plánu prací. V závěru semestru student obvykle začne psát koncept úvodních částí své diplomové práce.</p> <p>Diplomový projekt studenti řeší po celou dobu studia, přičemž hodinová dotace i počty kreditů postupně narůstají; 1ZS (A): 6 hod., 6 kr., 1LS (B): 10 hod., 10 kr., 2ZS (C): 18 hod., 22 kr. a 2LS (D): 26 hod., 28 kr. Výsledkem diplomového projektu je diplomová práce, jejíž obhajoba je součástí státní závěrečné zkoušky. V diplomové práci studenti popíší stav poznání v dané oblasti, formulují cíl projektu, popíší postup vlastních výzkumných prací a dosažené výsledky, které kriticky zhodnotí, popř. porovnájí s již uveřejněnými podobnými výsledky jiných autorů.</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
Základní monografie dané vědní oblasti, nové publikace v časopisech.				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>			<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
Název studijního předmětu	Statistická termodynamika		č. MC260P105
Typ předmětu	PV	Dopor. ročník / semestr	2 ZS
Rozsah studijního předmětu	30	2/0	kreditů 3
Jiný způsob vyjádření rozsahu		Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Zk	Forma výuky	přednáška
Další požadavky na studenta			
Vyučující	Doc.RNDr. Petr Nachtigall Ph.D.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>			
<p>Základní definice, postuláty (pravděpodobnost, soubor). Propojení termodynamiky, statistiky a kvantové mechaniky. Kanonický a velký kanonický soubor.</p> <p>Ideální plyn. Fermiho-Diracova, Boseho-Einsteinova a Maxwelllova-Boltzmannova statistika. Energetická nula. Translační, rotační, vibrační, elektronické a jaderné příspěvky k termodynamickým funkcím. Přímé určení rovnovážné konstanty. Směs ideálních plynů.</p> <p>Mezimolekulární potenciály. Reálný plyn. Viriální rozvoj. Vyjádření viriálních koeficientů pomocí Mayerových funkcí. Viriální koeficienty pro modelové párové potenciály. Resumace viriálních rozvoje.</p> <p>Ideální krystal. Distribuční funkce frekvencí. Einsteinova a Debyeova teorie krystalu. Tepelná kapacita a teplotní limity. Jednodimensionální případ, Fonony.</p> <p>Kvasiklasický postup. Teorie tekutin. Van der Waalsova rovnice a Kirkwoodova rovnice. Simulační metody, metody Monte Carlo a molekulární dynamiky. Distribuční funkce a termodynamické funkce. Metody k určení distribučních funkcí. Teorie rostoucí částice, stavové rovnice. Poruchové metody.</p> <p>Fázové přechody, Isingův model. Mean field theory a renormalization group theory.</p> <p>Nerovnovážná termodynamika, Liouvilleův operátor, časově závislý souborový průměr. Boltzmannova rovnice, korelační funkce, absorpce záření.</p> <p>Teorie adsorpce. Vlastnosti povrchu, mezimolekulární působení. Langmuirova izoterma. izoterma BET. Distribuční funkce pro speciální geometrie.</p>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
D. McQuarrie, Statistical Mechanics (Harper & Row, New York)			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
D. Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics (Oxford University Press)			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
Název studijního předmětu	Diplomový projekt (D)			č. MC260DP5B
Typ předmětu	P	Dopor. ročník / semestr		2 LS
Rozsah studijního předmětu	390	hod. za týden	0/26	kreditů 28
Jiný způsob vyjádření rozsahu				Počet semestrů 1 X 2
Způsob zakončení	Z	Forma výuky		samostatná práce
Další požadavky na studenta				
Vyučující	Vedoucí diplomového projektu, popř. další vedoucí-konzultant - podle tématu diplomového projektu.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>Závěrečná fáze vlastních výzkumných prací završená sepsáním a obhajobou diplomového projektu. V tomto semestru dojde vzhledem k hodinové dotaci a počtu kreditů k významnému zvýšení intenzity práce studenta na tématu diplomového projektu. V prvních dvou měsících budou dokončeny a kriticky vyhodnoceny experimentální či teoretické práce a ve zbývajícím čase student sepíše diplomovou práci v těsné interakci s vedoucími diplomového projektu (dále se obvykle podílí na přípravě publikace) a připraví si referát na obhajobu.</p> <p>Diplomový projekt studenti řeší po celou dobu studia, přičemž hodinová dotace i počty kreditů postupně narůstají; 1ZS (A): 6 hod., 6 kr., 1LS (B): 10 hod., 10 kr., 2ZS (C): 18 hod., 22 kr. a 2LS (D): 26 hod., 28 kr. Výsledkem diplomového projektu je diplomová práce, jejíž obhajoba je součástí státní závěrečné zkoušky. V diplomové práci studenti popíší stav poznání v dané oblasti, formulují cíl projektu, popíší postup vlastních výzkumných prací a dosažené výsledky, které kriticky zhodnotí, popř. porovnájí s již uveřejněnými podobnými výsledky jiných autorů.</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
Nejnovější publikace vtaahující se k danému tématu.				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky		
Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Vibrační spektroskopie</b>		č. <b>MC260P14</b>
<b>Typ předmětu</b>	PV	<b>Dopor. ročník / semestr</b>	LS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	45	2/1	<b>kreditů</b> 4
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>		<b>Počet semestrů</b>	1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Zk	<b>Forma výuky</b>	přednáška/cvičení
<b>Další požadavky na studenta</b>			
<b>Vyučující</b>	prof. RNDr. Blanka Vlčková CSc.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>	<p>Přednáška seznamuje s principy a metodami měření a interpretace vibračních spekter molekul, souborů molekul a krystalů. Obsahem jsou zejména principy, metodika a aplikace infračervené (IČ) a Ramanovy spektroskopie (stacionární i s čas. rozlišením) včetně rezonanční Ramanovy spektroskopie, spektroskopie povrchem-zesíleného Ramanova rozptylu (SERS) a spektroskopii nelineárního Ramanova rozptylu. Přednáška navazuje na přednášky Chemická struktura, Molekulová symetrie, Fyzika I a II.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Molekulová struktura a molekulové vibrace: normální souřadnice, normální vibrace, symetrie normálních vibrací. Metody experimentálního studia vibračních přechodů v molekulách-principy a výběrová pravidla.</li> <li>2. Základy metod optické spektroskopie: charakteristiky elektromagnetického záření, interakce záření s hmotou: rozptyl a absorpce, komplexní index lomu, dielektrická funkce, základní schéma optické aparatury.</li> <li>3. Principy, metodika a aplikace infračervené (IČ) spektroskopie.</li> <li>4. Principy, metodika a aplikace Ramanovy spektroskopie (pro neresonanční, lineární Ramanův rozptyl).</li> <li>5. Zpracování a vyhodnocování IČ a Ramanských spektrálních dat: parametry spektrálních pásů.</li> <li>6. Vibrační spektra izolovaných a interagujících molekul: vliv intermolekulárních interakcí na parametry pásů v IČ a Ramanových spektrech. Vibrační spektra krystalů.</li> <li>7. Interpretace vibračních spekter: Empirická interpretace vibračních spekter : Koncepce a cílené experimenty. Analýza normálních souřadnic (normal coordinate analysis, NCA). Příklad: NCA molekuly H<sub>2</sub>O Wilsonovou metodou GF matic.</li> <li>8. Resonanční Ramanův rozptyl (resonance Raman scattering, RRS): Teorie: stacionární přístup "sum over states" -A termová a B termová resonance: výběrová pravidla. Metodika: instrumentace a příprava vzorků. Příklady a aplikace: odhady a přibližné výpočty rozdílů ve struktuře molekuly v základním a rezonančním excitovaném elektronovém stavu z RR excitačních profilů, RR spektra a elektronová struktura porfyrinů.</li> <li>9. Povrchem-zesílený Ramanův rozptyl (surface-enhanced Raman scattering, SERS) a povrchem-zesílený rezonanční Ramanův rozptyl (surface-enhanced resonance Raman scattering, SERRS): Teorie: elektromagnetický (EM) mechanismus a chemický mechanismus SERSu; kombinace EM mechanismu a RRS v mechanismu SERRSu. Metodika: instrumentace a příprava vzorků-adsorpce molekul a iontů na SERS-aktivní povrchy. Příklady a aplikace: chemická a biochemická analýza, studium chemických a fotochemických reakcí na površích, studium struktury povrchových komplexů s fotoindukovaným přenosem náboje. SERS a SERRS na úrovni jediné molekuly.</li> <li>10. Nelineární Ramanův rozptyl: principy, instrumentace a vybrané aplikace hyper-Ramanova rozptylu a spektroskopii nelineárního Ramanova rozptylu prostřednictvím susceptibilit 3. řádu. Příklad: koherentní anti-Stokesův Ramanův rozptyl (coherent anti-Stokes Raman scattering, CARS).</li> </ol>		
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Infrared and Raman Spectroscopy, B. Schrader, Ed.; WCH Publishers, Weinheim, 1995.</li> <li>2. J. Štěpánek: Metody absorpční spektroskopie a spektroskopie Ramanova rozptylu v V. Prosser a kol. "Experimentální metody biofyziky", Akademia Praha 1989.</li> <li>3. K. Nakamoto: Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, 4th Edition. J. Wiley and Sons, New York, 1985.</li> <li>4. J.R. Ferraro, K. Nakamoto, C.W. Brown: Introductory Raman Spectroscopy, 2nd Edition. Academic Press, New York, 2003.</li> <li>5. C. F. Bohren and D. R. Huffman: Absorption and Scattering of Light by Small Particles. J. Wiley and Sons, New York, 1983.</li> </ol>		
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>		<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Fotochemie</b>			č. <b>MC260P05</b>
<b>Typ předmětu</b>	PV		<b>Dopor. ročník / semestr</b>	ZS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	30	<b>hod. za týden</b>	2/0	<b>kreditů</b> 3
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>				<b>Počet semestrů</b> 1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Zk		<b>Forma výuky</b>	přednáška
<b>Další požadavky na studenta</b>				
<b>Vyučující</b>	doc. RNDr. Jiří Fišer CSc., prof. K. Procházka, DrSc.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>Cílem přednášky je, aby studenti porozuměli základním principům fotofyzikálních a fotochemických procesů a jejich vybraným aplikacím.</p> <p>Elektronově excitované stavy atomů a molekul: klasifikace a fyzikální charakteristiky. Fotofyzikální a fotochemické procesy. Jablonskiho diagram. Štěpení singlet-triplet. Pravidlo nekřížení, kónický průsečík. Absorpce a emise záření. Výběrová pravidla pro elektronové přechody. Nezářivé přechody. Luminiscenční procesy: senzibilace, zhášení elektronové excitace. Přenos energie: Försterův a Dexterův mechanismus. Fluorescenční spektroskopie a její aplikace. Organická a anorganická fotochemie (příklady). Multifotonové procesy, laserová fotochemie. Časově rozlišené procesy, femtochemie.</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
N.J. Turro: Modern Molecular Photochemistry. Benjamin, 1995.				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
P. Suppan: Chemistry and Light. Roy. Soc. Chem., 1994. M. Klessinger, J. Michl: Excited States and Photochemistry of Organic Molecules. VCH, 1995. J. Michl, V. Bonacic-Koutecký: Electronic Aspects of Organic Photochemistry. Wiley, 1990.				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>			<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Metody molekulové dynamiky a Monte Carlo</b>		č. <b>MC260P79</b>
<b>Typ předmětu</b>	PV		<b>Dopor. ročník / semestr</b> ZS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	30	<b>hod. za týden</b> 2/0	<b>kreditů</b> 3
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>			<b>Počet semestrů</b> 1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Zk		<b>Forma výuky</b> přednáška
<b>Další požadavky na studenta</b>	Žádné.		
<b>Vyučující</b>	RNDr. Martina Roeselová, PhD., doc. RNDr. Pavel Jungwirth DSc.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>			
<p>Úvod do metod molekulové dynamiky a Monte Carlo pro simulace molekulových systémů. Vhodné zejména pro magisterské studenty a doktorandy PřF UK a MFF UK.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Minikurz statistické mechaniky - statistické soubory, výpočet termodynamických veličin, korelační a distribuční funkce, ergodický teorém.</li> <li>2. Meziatomové a mezimolekulové potenciály.</li> <li>3. Integrace klasických pohybových rovnic - metody Verlet a prediktor-korektor (Gear)</li> <li>4. Základy metod Monte Carlo. Metropolisova metoda generace kanonického souboru.</li> <li>5. Simulační protokol: počáteční podmínky, vstupní parametry, periodické okrajové podmínky, interakční cutoff, Ewaldova sumace, simulace za konstantní teploty a za konstantního tlaku.</li> <li>6. Metody vizualizace a analýzy výsledků.</li> </ol> <p>V rámci přednášky se bude konat jak teoretický výklad, tak praktické ukázky počítačových simulací.</p>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<p>M. P. Allen a D. J. Tildesley: Computer simulations of liquids, Clarendon Press, Oxford, 1991.  D. Frenkel a B. Smit: Understanding molecular simulations, Academic Press, New York, 2002.</p>			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>		<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
Název studijního předmětu	Programování v prostředí Matlab		č. MC260P89
Typ předmětu	PV	Dopor. ročník / semestr	ZS
Rozsah studijního předmětu	45	1/2	kreditů 4
Jiný způsob vyjádření rozsahu		Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Zk	Forma výuky	přednáška/cvičení
Další požadavky na studenta			
Vyučující	RNDr. Ota Bludský, CSc.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>			
<p>Cílem kurzu je zvládnutí základních programovacích technik potřebných k efektivní práci v prostředí MATLAB.</p> <p>Práce v prostředí MATLAB  Manipulace s vektory a maticemi, relační a logické operátory, datové struktury, analýza a vizualizace dat, programování v Matlabu, tvorba grafických uživatelských rozhraní.</p> <p>Příklady využití programového prostředí MATLAB  bioinformatika - UNIPROT databáze  spektroskopie - harmonický oscilátor, výpočty molekulových spekter  statistická mechanika - Isingův model (Monte Carlo metody)  kvantová chemie - Hueckelova metoda  chemická struktura - symetrie molekul  molekulová dynamika - integrace pohybových rovnic  chemická kinetika - oscilační reakce  optimalizační metody v chemii - matematické programování  zpracování textu - práce s regulárními výrazy  vizualizace - tvorba GUI (molecular viewer)</p>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
není nutná			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			



<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
Název studijního předmětu	Kvantová chemie		č. MC260P59
Typ předmětu	PV	Dopor. ročník / semestr	ZS
Rozsah studijního předmětu	45	2/1	kreditů 3
Jiný způsob vyjádření rozsahu		Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Zk	Forma výuky	přednáška/cvičení
Další požadavky na studenta			
Vyučující	Doc.RNDr. Petr Nachtigall Ph.D.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>			
<p>Přednáška seznamuje studenty se základními pojmy, modely a metodami kvantové chemie na takové úrovni, jež by umožňovala studentům porozumět odborným publikacím pojednávajících o aplikacích teorie elektronové struktury.</p> <p>Adiabatická a Bornova-Oppenheimerova aproximace. Variační metoda. Stacionární poruchová teorie. Hellmannova-Feynmanova věta. Model nezávislých částic. Slaterova-Condonova pravidla. Hartreeho-Fockovy-Roothaanovy rovnice. Populační analýza. Moment hybnosti. Spinové vlastní funkce. Korelační energie. Výpočty ab initio. Báze atomových orbitalů. Konfigurační interakce. Metoda MCSCF, Moellerova-Plessetova poruchová teorie. Spřažené klastry. Multireferenční metody. Teorie funkcionálu hustoty. Pseudopotenciály. Relativistické efekty. Stacionární body na hyperplochách potenciální energie.</p>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<p>J. Fišer: Introduction to Quantum Chemistry (in Czech). Academia, 1983.  P. Čársky, M. Urban: Ab initio Calculations in Chemistry (in Czech). SNTL, 1985.  W. Koch and M. Holthausen: A Chemist's Guide to DFT, Wiley-VCH, 2000.</p>			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<p>A. Szabo, S. Ostlund: Modern Quantum Chemistry. McGraw-Hill, 1989.  J. Simons and J. Nichols: Quantum Mechanics in Chemistry. OUP, 1997.  I. Levin: Quantum Chemistry, Prentice Hall, New Jersey 1991.</p>			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
Název studijního předmětu	<b>Základy programování I</b>			č. MC260P25
Typ předmětu	P	Dopor. ročník / semestr		1 ZS
Rozsah studijního předmětu	45	hod. za týden	2/1	kreditů 4
Jiný způsob vyjádření rozsahu				Počet semestrů 1 X 2
Způsob zakončení	Zk	Forma výuky		přednáška/cvičení
Další požadavky na studenta				
Vyučující	RNDr. Filip Uhlík, Ph.D.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>Tato přednáška slouží jako základní kurz programování pro studenty, kteří nikdy noprogramovali nebo programovali jen málo. Přednáška vysvětluje základní pojmy architektury počítačů, jejich technická omezení a způsoby jejich programování, poziční notaci čísel a jejich reprezentaci v počítači, vysvětluje rozdíl mezi algoritmem a programem a detailně popisuje způsob zápisu programů v programovacím jazyce C, jejich ladění a další programátorské techniky. Přednáška se prolíná se cvičením a vede studenty k procvičování přednesených principů v praktických úlohách od nejjednodušších (výpočet faktoriálu, Fibonacciho posloupnosti, kombinačních čísel, mocnin, ...) přes jednoduché (test prvočíselnosti, Eratostenovo síto, Pascalův trojúhelník, ...) až po netriviální úlohy (třídění, problém osmi dam na šachovnici, hledání optimálního mocnění, skládání Rubikovy kostky, ...).</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
B. W. Kernighan, D. M. Ritchie: The C Programming Language (2nd ed.), Englewood Cliffs, NJ, Prentice Hall, 1988.				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
P. Töpfer: Algoritmy a programovací techniky, Prometheus Praha 1995, 2. vydání 2007.				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky		
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
Název studijního předmětu	Spektrální metody NMR I		č. MC270P06B
Typ předmětu	PV	Dopor. ročník / semestr	ZS
Rozsah studijního předmětu	45	2/1	kreditů 4
Jiný způsob vyjádření rozsahu		Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Zk	Forma výuky	přednáška/cvičení
Další požadavky na studenta			
Vyučující	RNDr. Martin Dračínský Ph.D.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>			
<p>Záměrem přednášky je seznámit studenty se základními pojmy a principy v oblasti nukleární magnetické rezonance(NMR). Důraz je kladen na aplikaci spektroskopie NMR jako metody pro určování struktury organických sloučenin v roztoku. Cvičení je zaměřeno na praktickou interpretaci protonových a uhlíkových NMR spekter.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>základní principy NMR - jádro, magnetický moment, energie, populace hladin, magnetizace, rezonanční podmínka</li> <li>pulsní metoda - pulsy, relaxace, Fourierova transformace, spektrometr, magnety, postup měření</li> <li>spektrální parametry - chemický posun, stínění, reference, spin-spinová interakce, spinové systémy, pravidla multiplicity, řád spektra, <sup>13</sup>C satelity, intenzita signálů</li> <li>chemický posun - vliv elektronové hustoty, efekt sousedních skupin, magnetická anizotropie, ring-current efekt, efekty elektrického pole, intermolekulární interakce, izotopický efekt</li> <li>protonové chemické posuny - alkany, cykloalkany, alkeny, areny, alkyne, aldehydy, labilní vodíky</li> <li>uhlíkové chemické posuny - alkany, cykloalkany, alkeny, areny, alkyne, karbonylové sloučeniny, aldehydy, ketony, deriváty kyselin</li> <li>vztah mezi spektrem a strukturou - ekvivalence, symetrie, chiralita, homotopní, enantiotopní, diastereotopní skupiny</li> <li>interakční konstanty - geminální, vicinální, vlivy, Karplusova křivka, konstanty na aromátech, long-range, HH, CH, CP, CF konstanty</li> <li>dvojitá rezonance - dekapling, selektivní dekapling, potlačení rozpouštědla, vodíkový, uhlíkový dekapling, klíčovaný dekapling, mimorezonanční dekapling, APT, DEPT</li> <li>přiřazení signálů - protonová spektra - Shooleryho pravidla, empirické korelace, dekapling, rozpouštědla, teplota, derivatizace; uhlíková spektra - empirické korelace, dekapling, T1 časy, rozpouštědlo, teplota, derivatizace, posunová činidla, substituce deuteriem</li> <li>dynamické jevy - chemická výměna, vliv teploty, koalescence, příklady rovnováh</li> <li>dvoudimenzionální spektroskopie - princip, popis technik, rozdělení, příklad použití</li> </ol>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<p>H. Friebolin: Basic One and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, Wiley, Weinheim, 2005.  H. Günther: NMR Spectroscopy, Wiley, Chichester, 1995.  S.Bohm, S. Smrčková-Voltrová: Strukturní analýza organických sloučenin. Ediční a audiovizuální centrum VŠCHT, Praha 1995.  S. Voltrová: Příklady pro cvičení ze strukturní analýzy organických sloučenin . Ediční a audiovizuální centrum VŠCHT, Praha, 1996.</p>			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Chemická struktura</b>			č. <b>MC260P11N</b>
<b>Typ předmětu</b>	PV		<b>Dopor. ročník / semestr</b>	ZS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	60/30	<b>hod. za týden</b>	4/2	<b>kreditů</b> 6
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>				<b>Počet semestrů</b> 1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Zk		<b>Forma výuky</b>	přednáška/cvičení
<b>Další požadavky na studenta</b>	Předpokládá se, že student je obeznámen ze základními pojmy fyziky pro chemiky.			
<b>Vyučující</b>	doc. RNDr. Jiří Fišer CSc., prof. Ing. P. Čársky, DrSc.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>1. Stavba atomu: Axiomatika kvantové mechaniky. Jednoelektronové atomy a ionty. Model nezávislých elektronů. Atom helia. Pauliho princip. Variační princip. Nástin metody SCF. Vektorový model atomu a spektroskopická symbolika. Hundova pravidla. Spinorbitální interakce. Atomová spektra.</p> <p>2. Chemická vazba ve dvouatomových molekulách: Bornova-Oppenheimerova aproximace. Metoda valenční vazby. Metoda molekulových orbitalů (MO). Prvky a operace symetrie. Klasifikace MO a elektronická spektra dvouatomových molekul. MO a fotoelektronová spektra. Spektroskopická symbolika pro dvouatomové molekuly.</p> <p>3. Elektronová struktura víceatomových molekul a vazby v pevných látkách: Lokalizované a delokalizované MO. Hybridní orbitály. Klasifikace MO a celkových elektronových stavů nelineárních molekul. Hückelova metoda. Teorie krystalového a ligandového pole. Jahnova-Tellerova distorze. Molekuly s nadbytkem a deficitem elektronů. Princip zachování orbitalové symetrie v chemických reakcích. Slabé mezimolekulové interakce. Typy chemických vazeb v krystalech. Klastry. Nanočástice.</p> <p>4. Struktura molekul a molekulová spektra: Přehled metod studia molekulové struktury a jejich použití. Absorpční a emisní spektra. Rotační, vibrační a vibračně-rotační spektra dvouatomových molekul. Vibrace a rotace víceatomových molekul. Infračervená spektra a molekulová struktura. Lineární dichroismus a polarizace pásů v IČ spektrech. Ramanova spektra. Deaktivace elektronově excitovaných stavů. Fluorescenční spektra. Fotoelektronová spektroskopie. Lasery. Spektra NMR a ESR. Hmotnostní spektra. Difrakční metody. Spektra ORD a CD.</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
J. Fišer, F. Zemánek: Chemická struktura (skriptum). Karolinum, 1980.				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
P.W. Atkins: Physical Chemistry. Oxford University Press, 1998. (Též slovenský překlad, 1999). R.S. Berry, S.A. Rice, J. Ross: The Structure of Matter. Oxford University Press, 2002.				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>		<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>		
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
Název studijního předmětu	Molekulová symetrie			č. MC260P08
Typ předmětu	PV	Dopor. ročník / semestr		LS
Rozsah studijního předmětu	45	hod. za týden	2/1	kreditů 3
Jiný způsob vyjádření rozsahu				Počet semestrů 1 X 2
Způsob zakončení	Zk	Forma výuky		přednáška/cvičení
Další požadavky na studenta	Předpokládá se, že student je obeznámen ze základními pojmy chemické struktury.			
Vyučující	doc. RNDr. Jiří Fišer CSc.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
První část kurzu je věnována matematickým základům molekulové symetrie – teorii grup. Druhá část se zabývá aplikacemi teorie grup v elektronové struktuře molekul a chemické vazbě, ve vibrační spektroskopii a v chemických reakcích.				
Některé jednoduché aplikace molekulové symetrie. Grupy, podrupy, třídy, permutační a bodové grupy. Maticové reprezentace grup. Některé důležitější věty o ireducibilních reprezentacích. Rozklad reprezentace. Direktní součin reprezentací. Sestup v symetrii (korelace grup). Grupa symetrie hamiltoniánu. Symetricky adaptované funkce. Maticové elementy a symetrie. Elektronová struktura molekul a symetrie. Teorie grup a molekulové vibrace. Nerigidní molekuly a permutačně-inverzní grupy. Symetrie a chemické reakce: Wignerova-Witmerova korelační pravidla, pravidlo nekřížení, zachování orbitalové symetrie v chemických reakcích, teorie hraničních orbitalů.				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
J. Fišer: Úvod do molekulové symetrie. SNTL, 1980.				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
F.A. Cotton: Chemical Applications of Group Theory. Wiley, 1990. S.F.A. Kettle: Symmetry and Structure, Wiley, 1995. R.L Carter: Molecular Symmetry and Group Theory, Wiley, 1998.				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky		
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
Název studijního předmětu	Makromolekulární chemie II		č. MC260P78
Typ předmětu	PV	Dopor. ročník / semestr	ZS
Rozsah studijního předmětu	75	3/2	kreditů 6
Jiný způsob vyjádření rozsahu		Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Z, Zk	Forma výuky	přednáška/seminář
Další požadavky na studenta	Prezentace zadaných tématických okruhů na úrovni základního kurzu Makromolekulární chemie MC260P37.		
Vyučující	prof. RNDr. Jiří Vohlídal CSc.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>			
<p>Pokročilý kurz makromolekulární chemie v komplexním pojetí "vědy o polymerech", ve kterém jsou detailně probrány a diskutovány principy klasifikace, terminologie a názvosloví polymerů, moderní metody jejich přípravy a charakterizace, vlivy molekulární struktury, reaktivity a morfologie na vlastnosti polymerů, postupy navrhování polymerů pro praktické aplikace polymerů, moderní trendy materiálového výzkumu polymerů, recyklace polymerů.</p>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<p>Terminologická a nomenklaturní doporučení IUPAC (Polymer Division IV) (<a href="http://www.iupac.org">www.iupac.org</a>).            Technické zprávy a doporučení IUPAC (<a href="http://www.iupac.org">www.iupac.org</a>).</p>			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Biofyzikální chemie I</b>		č. <b>MC260P44</b>
<b>Typ předmětu</b>	PV	<b>Dopor. ročník / semestr</b>	ZS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	75	3/2	<b>kreditů</b> 6
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>		<b>Počet semestrů</b>	1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Zk	<b>Forma výuky</b>	přednáška/seminář
<b>Další požadavky na studenta</b>			
<b>Vyučující</b>	doc. RNDr. Tomáš Obšil Ph.D.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>	<p>Základní přednáška, v níž jsou probírány základní principy využití metod fyzikální chemie při studiu biologických systémů. Hlavní pozornost je věnována studiu struktury a vlastností biopolymerů a metodám, které se používají.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Základy bioenergetiky. Gibbsova energie a její vlastnosti. Rovnovážná konstanta. Definice standardního stavu v biochemii. Energetické spráhnutí. Makroergní vazby.</li> <li>2. Základy enzymové kinetiky. Princip katalýzy. Základní mechanismy enzymové katalýzy. Kinetika Michaelise-Mentenové. Inhibice.</li> <li>3. Struktura proteinů. Fyzikálně-chemické vlastnosti aminokyselin. Peptidová vazba. Primární struktura. Nevazebné molekulární interakce a jejich význam pro strukturu biopolymerů. Hydrofobní efekt. Typy sekundární struktury. Strukturní motivy. Strukturní domény. Terciární struktura. Kvartérní struktura. Faktory ovlivňující stabilitu proteinů.</li> <li>4. Struktura nukleových kyselin. Struktura nukleotidů. Principy párování bazí. Popis konformace řetězce nukleové kyseliny. Konformace pentosy. Struktura A,B a Z formy DNA. Sekundární struktura DNA. Deformace reálné DNA ? Dickersonův dodekamer. Nomenklatura helikálních parametrů. Faktory ovlivňující stabilitu DNA. Nestandardní párování bazí v RNA. Motivы sekundární struktury RNA. Ribozymy.</li> <li>5. Struktura biologických membrán. Asociované koloidy. Hydrofobní efekt. Termodynamické principy spontánní asociace. Model fluidní mozaiky. Pohyby lipi-dů v membráně. Příklady membránových proteinů. Typy membránových transportních mechanismů.</li> <li>6. Predikce struktury proteinu. Metody predikce sekundární struktury. Principy molekulové mechaniky. Principy homologního (srovnávacího) modelování. Ukázka tvorby homologního modelu. Ab initio predikce struktury proteinů (metoda Rosetta). Kontrola stereochemické kvality modelu.</li> <li>7. Molekulová dynamika. Princip a možnosti MD simulace. Aplikace MD při studiu funkce proteinů. Princip predikce interakce protein-ligand (ligand docking).</li> <li>8. Příprava rekombinantních proteinů. Příprava expersního konstruktů. PCR. Expresní systémy. Metody purifikace proteinů. Dialýza. Určování koncentrace roztoku proteinu. Zvyšování koncentrace roztoku proteinu.</li> <li>9. Spektroskopie. Principy UV-VIS spektroskopie. Typy elektronových přechodů. Výběrová pravidla. Franckův-Condorův princip. Využití absorpčních spekter při studiu biochemických reakcí. Kruhově polarizované světlo. Cirkulární dichroismus a optická rotační disperze. Studium sekundární struktury proteinů pomocí CD.</li> <li>10. Fluorescenční spektroskopie. Jablonského diagram. Doba života excitovaného stavu. Kvantový výtěžek. Zhášení fluorescence. Vliv polaritы rozpouštědla. Vliv teploty. Försterův rezonanční přenos energie. Aplikace při studiu biopolymerů. Anisotropie fluorescence. Aplikace v biochemii. Rozptyl světla. Typy rozptylu. Ramanova spektroskopie.</li> <li>11. Nukleární magnetická rezonance. Princip 1D-NMR. Princip 2D-NMR. Studium struktury proteinů pomocí 2D-NMR.</li> <li>12. Proteinová krystalografie. Princip metody. Techniky krystalizace proteinů. Základy krystalografie a teorie difrakce.</li> </ol>		
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>	Kodíček, M., Karpenko, V.: Biofyzikální chemie, Academia, Praha, 2000.		
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>	<p>Vodrážka, Z.: Fyzikální chemie pro biologické vědy, Academia, Praha 1982.  Kalous, V., Pavlíček, Z.: Biofyzikální chemie, SNTL, Praha 1980.  Bergethon, P. R.: The Physical Basis of Biochemistry, Springer Verl., New York 1998.  Tinoco, I., Sauer, K., Wang, J.C.: Physical Chemistry - Principles and Applications in Biological Sciences. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey 1985  Cantor, C.R., Schimmel, P.R.: Biophysical Chemistry I-III, W.H. Freeman and Company, San Francisco 1980.  Price, N. C., Dwek, R. A.: Principles and Problems in Physical Chemistry for Biochemists, Clarendon Press, Oxford 1979.  Segel, I. H.: Biochemical Calculations, J. Wiley, New York 1968.  Skriptum: Karpenko, V.: Řešené příklady z fyzikální chemie pro biology, SPN, Praha 1990.</p>		
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>		<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Biofyzikální chemie II</b>		č. <b>MC260P45</b>
<b>Typ předmětu</b>	PV	<b>Dopor. ročník / semestr</b>	LS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	45	2/1	<b>kreditů</b> 4
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>		<b>Počet semestrů</b>	1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Zk	<b>Forma výuky</b>	přednáška/seminář
<b>Další požadavky na studenta</b>			
<b>Vyučující</b>	doc. RNDr. Tomáš Obšil Ph.D.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>	<p>Tato přednáška navazuje a rozšiřuje přednášku Biofyzikální chemie I (MC260P44). Hlavní pozornost je věnována pokročilým metodám studia a interpretace struktury a funkce biopolymerů, zejména rentgenostrukturní analýze, NMR, kryoelektronové mikroskopii, analytické ultracentrifugaci, mikrokolorimetrii či povrchové plasmonové resonanci).</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Základní přehled a srovnání metod studia struktury biopolymerů.</li> <li>2. Krystalizace proteinů, popis krystalu, krystalografická symetrie, krystalové soustavy, základní jednotka, asymetrická jednotka.</li> <li>3. Teorie difrakce. Difrakce na jednom elektronu. Difrakce na atomu. Definice atomového rozptylového faktoru. Definice strukturního faktoru.</li> <li>4. Teorie difrakce. Odvození difrakčních (Laueho) podmínek. Reciproká mřížka. Ewaldova konstrukce. Fázový problém.</li> <li>5. Řešení fázového problému. Pattersonova mapa a určení polohy těžkých atomů. Principy metod MIR, SIR, SAD, MAD. Princip metody molekulového nahrazení.</li> <li>6. Zpracování a analýza difrakčních dat. Stavba modelu struktury. Metody upřesňování struktury. Analýza strukturního modelu.</li> <li>7. Princip NMR, 2D NMR. Měření COSY a NOESY. Princip získání strukturní informace z NMR dat.</li> <li>8. Kryoelektronová mikroskopie a její využití v biofyzikální chemii proteinů.</li> <li>9. Metody analytické ultracentrifugace. Metody sedimentačních rychlostí a sedimentační rovnováhy.</li> <li>10. Mikrokolorimetrie. Isotermální titrační kalorimetrie a diferenční skenovací kalorimetrie.</li> <li>11. Povrchová plasmonová resonance.</li> </ol>		
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>	Kodíček, M., Karpenko, V.: Biofyzikální chemie, Academia, Praha, 2000.		
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>	<p>Vodrážka, Z.: Fyzikální chemie pro biologické vědy, Academia, Praha 1982.  Kalous, V., Pavlíček, Z.: Biofyzikální chemie, SNTL, Praha 1980.  Bergethon, P. R.: The Physical Basis of Biochemistry, Springer Verl., New York 1998.  Tinoco, I., Sauer, K., Wang, J.C.: Physical Chemistry - Principles and Applications in Biological Sciences. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey 1985  Cantor, C.R., Schimmel, P.R.: Biophysical Chemistry I-III, W.H. Freeman and Company, San Francisco 1980.  Price, N. C., Dwek, R. A.: Principles and Problems in Physical Chemistry for Biochemists, Clarendon Press, Oxford 1979.  Segel, I. H.: Biochemical Calculations, J. Wiley, New York 1968.  Skriptum: Karpenko, V.: Řešené příklady z fyzikální chemie pro biology, SPN, Praha 1990.</p>		
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>		<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			



<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
Název studijního předmětu	Biomakromolekulární chemie		č. MC260P46
Typ předmětu	PV	Dopor. ročník / semestr	LS
Rozsah studijního předmětu	45	2/1	kreditů 4
Jiný způsob vyjádření rozsahu		Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Zk	Forma výuky	přednáška/seminář
Další požadavky na studenta			
Vyučující	RNDr. František Rypáček CSc.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>			
<p>Cílem kursu je poskytnout základní informace potřebné k pochopení principů a mechanismů interakcí, ke kterým dochází při kontaktu syntetického polymeru s biologickým prostředím, a vysvětlit podmíněnost těchto interakcí strukturou a fyzikálními i chemickými vlastnostmi použitých polymerů. Kurz je uspořádán do tematických bloků. Předpokládá se aktivní práce studentů s původní literaturou při doplňování konkrétních poznatků a příkladů dokumentujících jednotlivá témata</p> <p>BIOMATERIÁLY A BIOMEDICINÁLNÍ POLYMERY : DŮVODY STUDIA, CÍLE A MOŽNOSTI Fyzikální formy a vlastnosti polymerních biomateriálů. POLYMERNÍ BIOMATERIÁLY: STRUKTURA, PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI Biopolymery; Syntetické polymery ; (Bio)degradovatelné a bioanalogické polymery. Polymer-modifikační reakce POLYMERY A BIOLOGICKÉ PROSTŘEDÍ Kompartmentový model organismu: nejvýznamnější kompartmentové přechody určující biodistribuci a farmakokinetiku polymerů. Biokompatibilita polymerů. Imunitní vlastnosti polymerů. (Bio)degradace polymerů. BIOLOGICKÉ A BIOMEDICINÁLNÍ APLIKACE POLYMERŮ Biomateriály jako protetické materiály v lékařství. Farnaceutické aplikace. Systémy pro řízené uvolňování aktivních látek: principy, role polymerního materiálu. PERSPEKTIVY A NOVÉ SMĚRY Polymery pro buněčné terapie a regenerace tkání (tkáňové inženýrství). Biomimetické modifikace polymerů. Bioanalogické systémy.</p>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<p>Drobník, J., Rypáček, F., Soluble Synthetic Polymers in Biological Systems, <i>Adv. Polym. Sci.</i>, 57: 1-50, 1984 Bronzino, J.D. (Ed.) <i>The Biomedical Engineering Handbook</i>, CRC Press, 1995 Dee, K.C., Puleo, D.A., Bizios, R., <i>Tissue-Biomaterial Interaction (An introduction)</i>, Wiley-Liss, 2002 Lanza, R.P., Langer, R., Vacanti, J., (Eds.) <i>Principles of Tissue Engineering</i>, 2nd Ed., Academic Press, 2000 Atala, A., Lanza, R.P., (Eds.) <i>Methods of Tissue Engineering</i>, Academic Press, 2002 Mobley, D.P. (Ed.) <i>Plastics from Microbes: Microbial Synthesis of Polymers and Polymer Precursors</i>, Hanser Publishers, Munich-Vienna-New York, 1994. Langer, R., Polymeric delivery systems for controlled drug release. <i>Chem. Eng. Commun.</i>, 6: 1-48 (1980). Fan, L. T. and Singh, S. K., <i>Controlled release. A quantitative treatment</i>. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1989. Higuchi, T., Mechanism of sustained-action medication, theoretical analysis of rate of release of solid drugs dispersed in solid matrices. <i>J. Pharm. Sci.</i>, 52: 1145-1149 (1963) Korsmeyer, R. W., Gurny, R., Doelker, E., Buri, P., and Peppas, N. A. Mechanisms of solute release from porous hydrophilic polymers. <i>Int. J. Pharm.</i>, 15: 25-35, (1983)</p>			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	<b>Elektromigrační separační procesy</b>			č. <b>MC260P07</b>
<b>Typ předmětu</b>	PV		<b>Dopor. ročník / semestr</b>	ZS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	45	<b>hod. za týden</b>	2/1	<b>kreditů</b> 4
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>				<b>Počet semestrů</b> 1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Zk		<b>Forma výuky</b>	přednáška/cvičení
<b>Další požadavky na studenta</b>				
<b>Vyučující</b>	prof. RNDr. Bohuslav Gaš CSc.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>Tato výběrová přednáška je určena pro studenty v magisterském a doktorském stupni. Je zaměřena na pochopení základních principů všech módů elektroforézy určené především pro analytické separace látek. Je doporučeno, aby po této přenášce následoval kurz C230P24 (Coufal, Jelínek: Elektromigrační metody), který je zaměřen na praktické aspekty elektromigračních separačních metod.</p> <p>1. Klasifikace elektromigračních separačních metod. Pohyb nabitých částic v roztoku v elektrickém poli, pohyblivost iontů, rovnice kontinuity, podmínka elektroneutality, Kohlrauschova regulační funkce. Jedno a vícesytné slabé elektrolyty, výpočet pH roztoků elektrolytů pomocí počítačových programů, efektivní pohyblivost látek (konstituentů).</p> <p>2. Konfigurace elektrolytů v různých módech: kapilární izotachoforéza, zónová elektroforéza, izoelektrická fokusace. Účinnost, rozlišení, selektivita separace v zónové elektroforéze. Rušivé jevy při zónové elektroforéze: difuze, teplotní efekty, sorpce na stěnu, laminární tok. Elektroosmotický tok: jeho vznik, ovlivnění, důsledky. Elektromigrační disperze, systémové píky, eigenmobility v elektroforéze. Počítačová simulace chování separovaných analytů v elektrolytových systémech, počítačová optimalizace složení elektrolytů. Praktické zásady pro navrhování elektrolytových systémů.</p> <p>3. Konfigurace elektroforézy se zvýšenou selektivitou separace: chirální elektroforéza, micelární elektrokinetická chromatografie, kapilární elektrochromatografie, přídavky interagujících činidel do základních elektrolytů. Elektroforéza v prosévacích médiích - elektroforéza v gelech a roztocích lineárních polymerů, separace proteinů a DNA. Elektroforéza v genomice a proteomice.</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<p>F.Foret, L. Křivánková, P. Boček: Capillary Zone Electrophoresis, VCH Weinheim, Germany, 1993  R.A.Mosher, D.A.Saville, W.Thormann: The Dynamics of Electrophoresis, VCH Weinheim, Germany, 1992</p>				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>				<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
Název studijního předmětu	Exkurze			č. MC240T37
Typ předmětu	PV		Dopor. ročník / semestr	LS
Rozsah studijního předmětu	15		0/1 kreditů	1
Jiný způsob vyjádření rozsahu			Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Z		Forma výuky	exkurze
Další požadavky na studenta				
Vyučující	doc. RNDr. David Havlíček CSc.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<p>Exkurze je určena všem studentům 4. ročníku chemických oborů s výjimkou biochemie. Smyslem je navštívit vybrané podniky chemického průmyslu. Program je variabilní. V minulých letech se studenti seznámili s výrobou kyseliny fluorovodíkové, polyesterových pryskyřic, kyseliny dusičné a ledků pro zemědělství, diurananu amonného a také tabulového skla a piva.</p>				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
není nutná				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
Rozsah konzultací (soustředění)			celkem hodin kontaktní výuky	
Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>			
Název studijního předmětu	Techniky NMR spektroskopie		č. MC260P107
Typ předmětu	PV	Dopor. ročník / semestr	LS
Rozsah studijního předmětu	45	3/0	kreditů 4
Jiný způsob vyjádření rozsahu		Počet semestrů	1 X 2
Způsob zakončení	Zk	Forma výuky	přednáška
Další požadavky na studenta			
Vyučující	RNDr. Zdeněk Tošner Ph.D.		
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>			
<p>Posluchači budou seznámeni se základním fyzikálním popisem nukleární magnetické rezonance (NMR) a různých experimentálních technik s aplikacemi v kapalných roztocích. Vedle interpretace jednoduchých spekter bude hlavní důraz kladen na možnosti sledování dynamických procesů malých molekul, jako jsou pohyblivost, konformační změny, vznik a rozpad komplexů a mezimolekulární interakce. Kurz doplní základní aplikace NMR v pevných vzorcích.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1.) Jev NMR, NMR spektrum, NMR spektrometr.</li> <li>2.) Vektorový model, moderní popis NMR, rotace a produktové operátory.</li> <li>3.) NMR interakce (chemický posuv, přímá a nepřímá dipól-dipólová interakce, kvadrupolární jádra).</li> <li>4.) Interpretace základních NMR spekter.</li> <li>5.) Selektivní excitace a inverze, využití gradientů magnetického pole.</li> <li>6.) Spinová relaxace, jaderný Overhauserův efekt.</li> <li>7.) Chemická výměna. Translační difuze.</li> <li>8.) Mezimolekulární interakce, stanovování chemických rovnováh, využití relaxačních měření.</li> <li>9.) Základy vícerozměrné spektroskopie, korelace po vazbách a přes prostor, heteronukleární korelace.</li> <li>10.) Základy NMR v pevných látkách.</li> </ol>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<p>J.Keeler: Understanding NMR Spectroscopy, Wiley, 2005.  N.E.Jacobsen: NMR Spectroscopy Explained, Wiley, 2007.</p>			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>			
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>			
Rozsah konzultací (soustředění)		celkem hodin kontaktní výuky	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>			

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	Fyzikální chemie makromolekul			č. MC260P30
<b>Typ předmětu</b>	PV	<b>Dopor.ročník /semestr</b>		LS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	45	<b>hod. za týden</b>	3/0	<b>kreditů</b> 4
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>				<b>Počet semestrů</b> 1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	Zk	<b>Forma výuky</b>		přednáška
<b>Další požadavky na studenta</b>				
<b>Vyučující</b>	Prof. RNDr. Karel Procházka, DrSc.			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>	<p>V tomto kurzu se studenti seznámí se základy fyzikální chemie polymerů a koloidů, tj. s konformační statistikou polymerních molekul, s chováním makromolekul v roztocích a v pevném skupenství, dále s fázovými rovnovahami makromolekulárních systémů. Ve druhé části budou probrány důležité experimentální metody pro studium polymerů. V úvodu budou zopakovány základy statistické termodynamiky, nutné pro další výklad.</p> <p><b>I. FYZIKÁLNÍ CHEMIE POLYMERŮ</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Konformační statistika izolovaného ideálního řetězce.</li> <li>2. Vzdálenost konců řetězce a gyrační poloměr polymerního klubka.</li> <li>3. Pevné valenční úhly a rotace kolem C-C vazeb.</li> <li>4. Zředěné roztoky polymerů (vliv vyloučeného objemu segmentů).</li> <li>5. Koncentrované roztoky polymerů.</li> <li>6. Rovnováha dvou kapalných fází (amorfní polymer v jednosložkovém rozpouštědle).</li> <li>7. Frakcionace polymerů - UCST a LCST.</li> <li>8. Krystalizační, osmotická a botnací rovnováha. Osmometrie.</li> </ol> <p><b>II. METODY STUDIA POLYMERŮ</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Statický (elastický Rayleighův) rozptyl viditelného záření.</li> <li>2. Kvasielastický rozptyl světla.</li> <li>3. Rozptyl neutronů a paprsků X.</li> <li>4. Ultracentrifugace - metoda sedimentační rychlosti, metoda sedimentační rovnováhy.</li> <li>5. GPC a viskozimetrie.</li> <li>6. Spektroskopické metody studia polymerů.</li> </ol>			
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>	<p>Karel Procházka: Fyzikální chemie polymerů (skripta) PřF UK, Carolinum Praha 1996.  Julius Pouchlý: Fyzikální chemie polymerů a koloidů (skripta), VŠCHT Praha 1999.  Petr Munk: Introduction to Macromolecular Science. J.Wiley Ins. N.York 1993.</p>			
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>				<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				

<b>D – Charakteristika studijního předmětu</b>				
<b>Název studijního předmětu</b>	Nanochemie			č. MC260P111
<b>Typ předmětu</b>	PV		<b>Dopor. ročník / semestr</b>	LS
<b>Rozsah studijního předmětu</b>	45	<b>hod. za týden</b>	3/0	<b>kreditů</b> 4
<b>Jiný způsob vyjádření rozsahu</b>				<b>Počet semestrů</b> 1 X 2
<b>Způsob zakončení</b>	zkouška		<b>Forma výuky</b>	přednáška
<b>Další požadavky na studenta</b>				
<b>Vyučující</b>	Dr. Pavel Matějčík			
<b>Osnova po jednotlivých blocích ev. týdnech výuky, příp. stručná anotace předmětu</b>				
<i>Anotace:</i> V tomto kurzu se studenti seznámí s chemií, kde zásadní roli hrají procesy a objekty v rozměru nano. Budou představeny hlavní experimentální metody, přístupy a jednotlivé typy nanomateriálů a nanočástic.				
<i>Osnova:</i> (1) základy (definice, metody, přístupy) (2) nanolitografie (self-assembled monolayer) (3) přístup „layer-by-layer“ (4) nanotisk a nanopsaní (5) nanotrubičky a nanodráty (6) nanoklastry (7) klastrové sloučeniny boru (8) mikrosféry, fotonické krystaly (9) mikro- a mesoporézní materiály (10) blokové kopolymery (11) bionanomateriály				
<b>Základní studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
Nanochemistry: A Chemical Approach to Nanomaterials; Geoffrey A. Ozin, André C. Arsenault; RSC publishing, Cambridge 2005.				
<b>Doporučená studijní literatura a studijní pomůcky</b>				
<b>Informace ke kombinované nebo distanční formě</b>				
<b>Rozsah konzultací (soustředění)</b>			<b>celkem hodin kontaktní výuky</b>	
<b>Rozsah a obsahové zaměření individuálních prací studentů a způsob kontroly</b>				