

**Tématické zkuškové okruhy pro část Molekulové spektrometrie
(C526 Spektrální analytické metody a C654 Atomová a molekulární spektrometrie)**

I. Úvod do molekulové spektrometrie, absorpční spektra v ultrafialové a viditelné (UV-VIS) oblasti, luminiscence

1. Základní společné rysy a odlišnosti spektrálních technik, energetické oblasti a typy přechodů, Planckův zákon, základní vztahy pro vyjádření energie.
2. Podstata vzniku absorpčních spekter v UV/VIS, chemická teorie barevnosti, chromofory, auxochromy, ovlivnění absorpčních maxim.
3. Molekulové orbitály, typy elektronů a jejich přechodů ve vztahu k absorpci, Franck-Condonův princip.
4. Instrumentace v UV/VIS spektrometrii, základní informace z interpretace UV/VIS spekter, Lambert-Beerův zákon, kvantitativní analýza.
5. Teoretické základy luminiscenčních metod, popis Jablonskiho diagramu.
6. Instrumentace ve fluorescenční spektrometrii, typy fluorescenčních spekter, využití v kvantitativní analýze.
7. Podstata fosforescence a základy instrumentace při měření fosforescence.

II. Infračervená (IČ) spektrometrie

1. Teoretické základy rotačně-vibrační spektrometrie, model lineárního a nelineárního oscilátoru.
2. Výběrová pravidla a intenzita pásů v IČ spektrometrii, charakter vibračních spekter v porovnání s ostatními spektrálními technikami.
3. Základní typy vibrací, faktory ovlivňující vibrační frekvence (vodíkové vazby, hmotnosti atomů, elektrické a sterické vlivy), rozdělení IČ oblasti spektra vzhledem k různým typům vibrací.
4. Instrumentace v IČ spektrometrii.
5. Princip IČ spektrometrie s Fourierovou transformací, základy instrumentace.
6. Základy interpretace IČ spekter, využití pro identifikaci organických látek.
7. Měření a využití IČ spektrometrie v blízké a vzdálené oblasti.
8. Ramanova spektrometrie - podstata, výběrová pravidla, instrumentace a aplikace.

III. Nukleární magnetická rezonance (NMR)

1. Teoretické základy nukleární magnetické rezonance, spin, magnetický moment jader, atomové jádro v magnetickém poli.
2. Chemický posun - definice, stupnice a standardy pro ^1H a ^{13}C , výpočet chemického posunu pro ^1H , vliv struktury na chemický posun.
3. Spin-spinová interakce homonukleární a heteronukleární, typy multipletů a jejich výpočet, odstranění spin-spinové interakce (decoupling), interakční konstanty.
4. Intenzita rezonančních signálů, interakce vyššího řádu, relaxace v NMR spektrometrii.
5. Dvoudimenzionální NMR spektra homokorelovaná a heterokorelovaná, využití pro strukturní analýzu.
6. Základy interpretace NMR spekter, využití pro strukturní analýzu organických látek.

IV. Hmotnostní spektrometrie (MS)

1. Obecné principy hmotnostní spektrometrie, základní části hmotnostního spektrometru, využití izotopů v hmotnostní spektrometrii.
2. Elektronová ionizace a chemická ionizace - principy, experimentální uspořádání, aplikace, určení molekulárního iontu, pravidla fragmentace.
3. Ionizační techniky pracující za atmosférického tlaku (ESI, APCI a APCI) - principy, experimentální uspořádání, aplikace.
4. Ionizace laserem za účasti matrice (MALDI), hmotnostně spektrometrické zobrazování (imaging), porovnání aplikačních oblastí měkkých a tvrdých ionizačních technik, záznam kladných vs. záporných iontů.
5. Hmotnostní analyzátory s nízkým a vysokým rozlišením, definice rozlišovací schopnosti, přesnosti určení hmoty, fyzikální principy separace iontů v plynné fázi za vakua, magnetický analyzátor s jednoduchou a dvojitou fokusací iontů.
6. Kvadrupólový analyzátor, iontová past, analyzátor doby letu (TOF).
7. Hmotnostní analyzátory s Fourierovou transformací - Orbitrap a iontová cyklotronová rezonance (ICR), tandemová hmotnostní spektrometrie.
8. Kvantita v hmotnostní spektrometrii, kalibrace hmotnostní stupnice, spojení separačních technik a hmotnostní spektrometrie (GC/MS a LC/MS).