



Proč studovat v programu „Fyzikální a výpočetní chemie“?

- ➔ Jedná se o program, v rámci kterého získáte rozšířené znalosti z fyzikální chemie a matematiky současně se základy IT. Tato kombinace Vás bude kvalifikovat pro rozmanité uplatnění v současném digitalizovaném světě.
- ➔ Program je koncipován na univerzální uplatnění absolventů, které může zasahovat i mimo rámec chemie. Naši absolventi našli zaměstnání ve velkých i malých firmách, ve školství, ve vědě, ve zdravotnictví, ve státní správě apod.
- ➔ Program umožňuje zapojení do vědecké práce. Pedagogové vyučující v programu jsou často úspěšní vědečtí pracovníci a studenti se podílí na jejich výzkumu.
- ➔ V závěrečných pracích můžete měřit fyzikálně-chemické vlastnosti čistých látek, směsí a materiálů. Naučíte se pracovat s přístroji běžně používaných v praxi i unikátními zařízeními.
- ➔ Můžete si také vybrat závěrečnou práci výpočetního či teoretického charakteru. Ty jsou například zaměřeny na počítačové simulace, kvantově-chemické výpočty, analýzu dat, nebo uplatnění umělé inteligence v chemii.
- ➔ Program má zázemí největší VŠ se zaměřením na chemii. Ale nejen to. Některé práce našich studentů vznikají i u odborníků externích vědeckých pracovišť a firem.
- ➔ Na bakalářské studium navazuje několik magisterských programů. Většina studentů se stane inženýry, z nichž někteří dále pokračují v doktorském studiu.

Proč se o tento program zajímat?

Když ještě netušíš, kam Tě vítr zavane

U nás najdeš přátelské prostředí ...

Pro každého se zkrátka něco najde...

Zvládnout se to dá, i když se někdy zapotíš

Když chceš být opravdovým inženýrem...

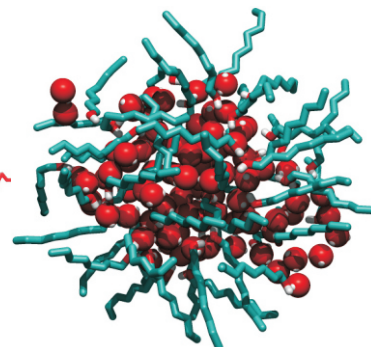
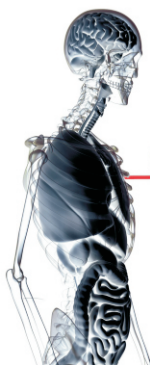
Co je „Průmysl 4.0“?

Koncept **Průmysl 4.0** dostal svůj název podle čtvrté průmyslové revoluce, která právě probíhá. Vznikl před pár lety v Německu a jeho posláním je řešit situaci, kterou způsobila čtvrtá průmyslová revoluce, jíž zcela evidentně vyvolal internet. Jeho podstatou je digitalizace, rozšiřování vysokorychlostního internetu, rozvoj chytrých technologií, komunikace a řada dalších témat. Toto se samozřejmě týká také chemie, bez které se dnešní svět neobejde.

Co je „Fyzikální a výpočetní chemie“?

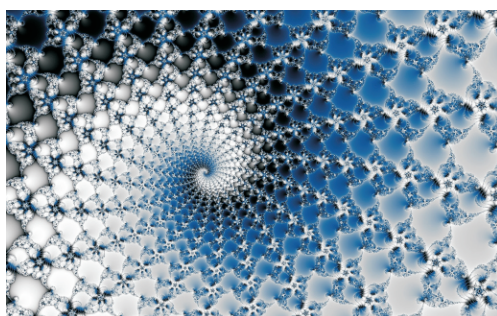
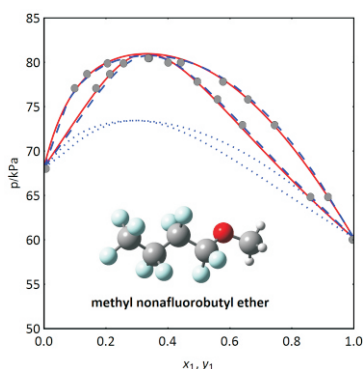
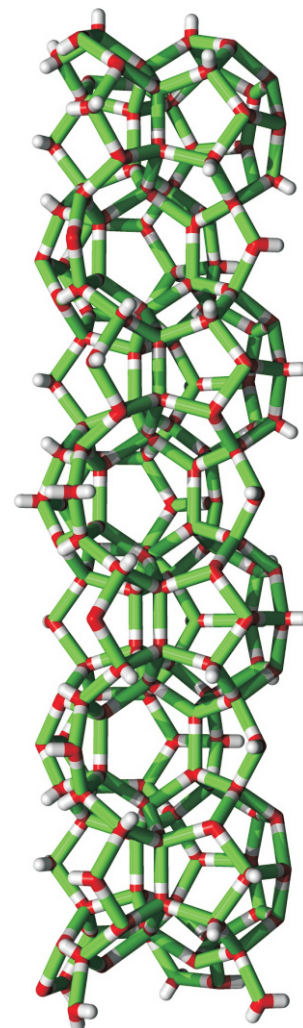
Fyzikální chemie studuje a popisuje obecné zákonitosti chemie, jako jsou vlastnosti látek, reakce, děje, jevy apod. Výsledky popisu pak přejímá celá řada chemických i nechemických oborů - např. organická a anorganická chemie, analytická chemie, chemické inženýrství, biochemie, chemie polymerů a kovů, energetika,

Výpočetní chemie - bez výpočtů to prostě nejde.



Vybraná témata bakalářských prací v programu “Fyzikální a výpočetní chemie”

- Termodynamická charakterizace dvousložkových systémů obsahujících ekologická rozpouštědla
- Měření a popis rozpustnosti oxidu uhličitého v netěkavých kapalinách
- Experimentální stanovení rozpustnosti léčiv v polymerech s využitím diferenční skenovací kalorimetrie
- Tvorba softwaru pro výpočty rovnovážných konstant
- 3D modelování a vizualizace v chemickém průmyslu
- Kombinovaná experimentální a teoretická studie termodynamických vlastností vybraných aktivních farmaceutických substancí
- Molekulová simulace mikrovlnného ohřevu vody a roztoků elektrolytů
- Membránové separace směsí obtížně dělitelných destilačními metodami
- Experimentální studium fázových rovnováh ve vodných roztocích laktonů a glymů
- Teoretické studium interakcí halogenovaných sloučenin s nukleovými kyselinami
- Moderní metody měření a řízení technologických procesů
- Průmysl 4.0 v teorii a praxi
- Kybernetika v diagnostice vzácných onemocnění



```

rr = Table[r[i] = h[[i]] == 0, {i, 1, mL}];
nrr = Table[nr[i] = n[i] > 0, {i, 1, nL}];
task = Join[{qt}, rr, nrr];

results = FindMinimum[task, nn];
nres = nn /. results[[2]];
Print["i Compound qi ni/mol yi"]
Table[{i, com[[i]], q[[i]], nres[[i]], (nres[[i]] / Sum[nres[[k]], {k, 1
TableForm

```

i	Compound	qi	ni/mol	yi
1	n-Butane	-61.081	0.0336276	1.46307
2	1-Butene	-44.322	0.125013	5.43907
3	cis-2-Butene	-44.188	0.109335	4.75695
4	trans-2-Butene	-44.536	0.154844	6.73695
5	2-Methylpropene	-44.998	0.245775	10.6932

Další informace a kontakty

Ústav fyzikální chemie:

doc. Karel Řehák, karel.rehak@vscht.cz, 220 444 039, <https://ufch.vscht.cz>

Ústav počítačové a řídicí techniky:

doc. Jan Mareš, jan.mares@vscht.cz, 220 444 172 <https://uprt.vscht.cz>

