

MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA



ŽÁDOST O AKREDITACI

Navazujícího magisterského studijního programu

C h e m i e

Obor

O r g a n i c k á c h e m i e

Brno, říjen 2011

OBSAH

OBSAH.....	1
A – Žádost o akreditaci / rozšíření nebo prodloužení doby platnosti akreditace bakalářského / magisterského stud. programu	3
Obor: Organická chemie	4
B – Charakteristika studijního programu a jeho oborů, pokud se na obory člení.....	4
C – Pravidla pro vytváření studijních plánů SP (oboru) a návrh témat prací	6
C1- Doporučený studijní plán	17
E – Personální zabezpečení studijního programu (studijního oboru) – souhrnné údaje.....	23
F – Související vědecká, výzkumná, vývojová, umělecká a další tvůrčí činnost	24
I – Uskutečňování akreditovaného stud. programu mimo sídlo vysoké školy	25
D – Charakteristika studijních předmětů.....	26
CA000 Oborový seminář IV	26
CA001 Diplomová práce IV	26
C4010 Anorganická chemie III	26
C4015 Anorganická chemie III - seminář	27
C4120 Makromolekulární chemie.....	28
C4450 Organická chemie III - syntéza.....	29
C4455 Organická chemie III - syntéza - seminář	29
C5020 Chemická struktura.....	30
C5030 Chemická struktura - seminář.....	31
C5040 Jaderná chemie	32
C5060 Metody chemického výzkumu.....	33
C5120 Počítače v chemii a chemometrie	34
C5140 Počítače v chemii a chemometrie - cvičení	35
C5241 Analytická chemie organických látek.....	35
C5320 Fyzikálně chemické základy NMR.....	36
C5380 Speciální laboratorní technika	37
C5440 Separční metody	38
C5500 Stereochemistry of Organic Compounds.....	39
C5510 Stereochemistry of Organic Compounds-seminar	40
C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie	41
C5870 EPR spektroskopie.....	41
C5880 Základy stereochemie	42
C5885 Základy stereochemie - seminář	43
C5900 Hmotnostní spektrometrie	43
C5910 Chromatografické metody I.....	44
C6010 Toxikologie	45
C6020 Jaderná chemie - laboratorní cvičení	46
C6180 Pokročilá organická chemie - praktikum.....	47
C6250 Metody chemického výzkumu - praktikum	48
C6310 Symetrie molekul.....	49
C6320 Chemická kinetika	49
C6330 Chemická kinetika - seminář	50
C6390 Fyzikální metody organické chemie - praktikum	50
C6410 Organická analýza - praktikum.....	50
C6740 Elektrické vlastnosti molekul	51
C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules	51
C6790 Hmotnostní spektrometrie	52
C6800 Multinukleární NMR spektroskopie	53
C6815 Struktura a vlastnosti polymerů	54
C6830 Radioekologie.....	54
C6850 Chromatografické metody II	55
C6860 Moderní metody analýzy organických polutantů	56
C6950 Chemická exkurze	57
C6960 Odborná praxe	57
C7000 Oborový seminář I	57
C7001 Diplomová práce I	58
C7031 Atomová spektrometrie	58

C7041 Molekulová spektrometrie	59
C7050 Elektroanalytické metody	60
C7110 Výpočetní technika - aplikace	61
C7410 Struktura a reaktivita	61
C7415 Struktura a reaktivita - seminář	62
C7440 Koordinace a katalýza	63
C7460 Identifikace organických látek - cvičení	64
C7670 Izotopové metody	64
C7680 Izotopové metody - laboratorní cvičení	64
C7700 Chemie nekovů	65
C7777 Zacházení s chemickými látkami	66
C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I	66
C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení	67
C7895 Hmotnostní spektrometrie biomolekul	67
C7995 Advanced Methods of Biomolecular NMR	68
C7999 Advanced Methods of NMR Spectroscopy	68
C8000 Oborový seminář II	69
C8001 Diplomová práce II	69
C8102 Speciální metody - laboratorní cvičení	70
C8500 Mechanismy organických reakcí	71
C8510 Mechanismy organických reakcí - seminář	72
C8700 Technologie chemických výrob	73
C8780 Organic Photochemistry	73
C8840 Chemie makrocyclických sloučenin	74
C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II	75
C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení	75
C8860 Syntetické metody "zelené" chemie	76
C8885 Supramolekulární chemie	76
C8950 NMR - Strukturní analýza	77
C9000 Oborový seminář III	78
C9001 Diplomová práce III	78
C9500 Užitá chemie	79
C9920 Úvod do kvantové chemie	80
JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška	80

A – Žádost o akreditaci / rozšíření nebo prodloužení doby platnosti akreditace bakalářského / magisterského stud. programu				
Vysoká škola	Masarykova univerzita			
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta	STUDPROG	st. doba	titul
Název studijního programu	Chemie		2	Mgr.
Původní název SP	Chemie	platnost předchozí akreditace	15.8.2012	
Typ žádosti		prodloužení akreditace	druh rozšíření	
Typ studijního programu	navazující magisterský		rigorózní řízení	
Forma studia	prezenční		KKOV	
Obor v tomto dokumentu	Organická chemie – prodloužení akreditace		Ano	1402T001
Obory v jiných dokumentech	Analytická chemie		Ano	1403T001
	Anorganická chemie		Ano	1401T002
	Fyzikální chemie		Ano	1404T001
	Chemie životního prostředí		Ano	2805T003
	Materiálová chemie		Ano	1407T007
	Strukturní chemie		Ano	1407T020
	Učitelství chemie pro střední školy		Ano	7504T075
Adresa www stránky	http://www.sci.muni.cz/akreditace2011	jméno a heslo k přístupu na www	Jméno: kom, heslo: akred2011	
Schváleno VR /UR /AR	VR PřF MU	podpis rektora		datum
Dne	5.10.2011			
Kontaktní osoba	doc. Mgr. Marek Nečas, Ph.D.	e-mail	man@physics.muni.cz	
Garant studijního programu	prof. RNDr. Jiří Pinkas, Ph.D.		jpinkas@chemi.muni.cz	

Obor: Organická chemie

B – Charakteristika studijního programu a jeho oborů, pokud se na obory člení	
Vysoká škola	Masarykova univerzita
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta
Název studijního programu	Chemie
Název studijního oboru	Organická chemie
Údaje o garantovi studijního oboru	doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.
Zaměření na přípravu k výkonu regulovaného povolání	ne
Charakteristika studijního oboru (studijního programu)	
<p>Organická chemie je jednou ze základních chemických disciplín zabývající se syntézou organických molekul, určováním jejich struktury a vztahem mezi strukturou a z toho vyplývající reaktivitou, poznání principů a mechanismů chemických dějů, přípravou nových organických molekul s požadovanými užitnými vlastnostmi a jejich aplikovatelností v praxi, zejména s výstupem do farmacie, biologie, chemie polymerů a obecně chemie nových materiálů. Tak výrazně přispívá ke snaze člověka o zlepšování kvality a délky života. Ve svém výzkumu se opírá o poznatky fyziky a zejména fyzikální chemie. Je významným zdrojem poznatků pro oblast biochemie, molekulární biologie a makromolekulární chemie.</p>	
Profil absolventa studijního oboru (studijního programu) & cíle studia	
<p>Absolvent magisterského studia Organické chemie je zběhlý v teoretických základech všech základních oborů chemie (anorganická, organická, fyzikální, analytická, biochemie, jaderná, chemie životního prostředí, makromolekulární chemie), dovede se orientovat v laboratorní technice celé chemie. Dovede pracovat s chemickými informacemi, orientovat se v chemické literatuře (sekundární i primární zdroje, databáze), vyhledávat v ní požadované informace a to i s využitím počítačových metod v komerčně dostupných databázích. Ovládá do hloubky strukturu jednotlivých organických sloučenin a z jejich struktury dovede odvodit chemické vlastnosti, využívá empirických vztahů pro toto posouzení. Dovede plánovat syntézy nových sloučenin eventuelně kriticky posoudit již navržené syntézy, ovládá retrosyntetický postup. Ovládá metody laboratorní techniky organické chemie v praxi, včetně moderních metod syntézy (PTC, micelární katalýza, reakce na tuhých nosičích, ultrasonické a mikrovlnné metody). Dovede se orientovat ve stereochemii organických molekul. Syntetizované neznámé sloučeniny dovede při aplikaci svých znalostí fyzikálních organických metod podrobit jak analýze čistoty eventuelně separaci složek, zejména chromatografickými separačními metodami (GC, GC/MS, HPLC, chromatografie na tenké vrstvě a na sloupci), tak určit strukturu látek na základě použití spektrálních metod. Je schopen z dodaných spektrálních záznamů odvodit složení neznámých látek. Ovládá běžně měření spekter UV / VIS, IČ, NMR, dovede vyhodnocovat MS. Vyzná se v aplikaci běžných komerčně dostupných programů pro kvantově chemické výpočty a chemické modelování, dovede je využít pro předvídání či vysvětlení jevů či reaktivity sloučenin. Je kvalifikován pro práci i s nebezpečnými látkami a přípravky. O výsledcích své práce je schopen sepsat zprávu a výsledky přednést na odborném fóru a to i s použitím moderní počítačové techniky prezentace. Celkově je absolvent schopen komplexního přístupu k řešení chemického problému. Tím jsou u absolventů vytvořeny předpoklady pro další doktorské studium na našich nebo zahraničních univerzitách, případně pro jejich uplatnění v široké oblasti profesí, kde je vyžadováno odborné vzdělání na vysokoškolské úrovni orientované na syntetické chemické procesy a fyzikálně chemické základy strukturních metod. Absolventi se uplatňují ve všech oborech činnosti, kde se využívají organické syntetické metody. Jsou to zejména chemický, farmaceutický a potravinářský průmysl, kontrolní laboratoře v průmyslu, laboratoře v ochraně životního prostředí, ve zdravotnictví a zemědělství, projekce a různé komerční instituce, domácí i zahraniční. Absolventi oboru Organická chemie jsou tak připraveni nejen na profesionální působení ve své specializaci, ale široké vzdělání jim umožňuje i snadnou adaptaci k působení v jiném oboru.</p>	
Charakteristika změn od předchozí akreditace (v případě prodloužení platnosti akreditace)	

Do studijního plánu byly zařazeny nové povinné předměty Struktura a reaktivita a Mechanismy organických reakcí včetně příslušných seminářů. Mezi povinně volitelné předměty bylo zařazeno praktikum C6180 Pokročilá organická chemie, které seznamuje studenty s tradičními i moderními metodami organické syntézy včetně použití fyzikálně-chemických metod (zejména NMR) pro charakterizaci produktů. Další drobné úpravy v nabídce povinně volitelných a doporučených předmětů.

Prostorové zabezpečení studijního programu

Budova ve vlastnictví VŠ ano Budova v nájmu – doba platnosti nájmu -

Informační zabezpečení studijního programu

Informační zdroje jsou zabezpečeny dvěma samostatnými knihovnami:

- 1) Ústřední knihovna Přírodovědecké fakulty umístěna v areálu na Kotlářské ulici.
- 2) Knihovna univerzitního kampusu, nově vzniklá v roce 2007 transformací Ústřední knihovny Lékařské fakulty MU, Knihovny Fakulty sportovních studií a integrací části Ústřední knihovny PřF MU. Knihovna je umístěna v areálu univerzitního kampusu v Bohunicích a slouží zejména studijním programům chemie a biochemie.

	Ústřední knihovna PřF MU	Knihovna univerzitního kampusu MU
Celkový počet svazků	357 310	31 741
Roční přírůstek knižních jednotek	5 070	798
Počet odebíraných titulů časopisů	603	79
Jsou součástí fondu kompaktní disky?	ano	ano
Jsou součástí fondů videokazety?	ano	ano
Otevírací hodiny knihovny/studovny v týdnu	42 hod týdně	47 hod týdně
Provozuje knihovna počítačové inform. služby?	ano	ano
Zajišťuje knihovna rešerše z databází?	ne, uživatelé samoobslužně	ano
Je zapojena na CESNET/INTERNET?	ano	ano
Počet stanic na CESNETu/INTERNETu	90	110
Počet počítačů v knihovně/studovně	79	91
Z toho počítačů zapojených v síti	79	91

C – Pravidla pro vytváření studijních plánů SP (oboru) a návrh témat prací					
Vysoká škola	Masarykova univerzita				
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta				
Název studijního programu	Chemie				
Název studijního oboru	Organická chemie				
Název předmětu	rozsah	způsob zák.	druh před.	přednášející	dop. roč.
Seznam předmětů je uveden v doporučeném studijním plánu, viz část C1.					
Obsah a rozsah SZZk					
<p>Státní závěrečná zkouška sestává z hlavního předmětu Organická chemie, Fyzikální chemie jako vědního základu a jednoho dalšího předmětu ze skupiny Analytická chemie, Anorganická chemie, Biochemie, Chemie životního prostředí a Materiálová chemie dle výběru. Zkouška z hlavního předmětu klade důraz na důkladné porozumění souvislostem a poznatkům získaným absolvováním povinných a povinně volitelných kurzů magisterského studia, přihlédnuto je ke specializaci kandidáta, dané zaměřením jeho diplomové práce. Rámcové okruhy témat ke státní závěrečné zkoušce jsou uvedeny níže. Součástí státní závěrečné zkoušky je též obhajoba diplomové práce, při níž má uchazeč prokázat schopnost prezentovat získané výsledky a orientovat se v problematice specializované oblasti i širší disciplíny na současné odborné úrovni. Obhajoba diplomové práce má formu ústní prezentace, během níž uchazeč seznámí komisi a posluchače s tématem a cíli práce, řešenými problémy, použitými metodami a získanými výsledky. Odpovídá na připomínky a dotazy obsažené v posudcích vedoucího a oponenta práce a reaguje na dotazy vznesené v průběhu diskuse.</p>					
Okruhy otázek – povinné předměty:					
<u>Organická chemie</u>					
ZÁKLADY ORGANICKÉ CHEMIE					
Vazby v organických sloučeninách, hybridní stav uhlíku, energie vazby, délka vazby, polarita vazby. Polarizovatelnost molekul. Jevy na vazbách – indukční a mesomerní efekt, konjugace. Chemické názvosloví. Principy tvorby systematického názvosloví organických sloučenin.					
ZÁKLADNÍ UHLÍKATÉ SKELETY ORGANICKÝCH MOLEKUL A JEJICH STRUKTURA A REAKTIVITA.					
Alkany a cykloalkany, chem. názvosloví. Isomerie řetězová, konformace alkanů a cykloalkanů se zvláštním zřetelem k cyklohexanovému kruhu. Spojování cyklohexanových kruhů. Newmannova projekce. Geometrická isomerie u cykloalkanů. Radikálové reakce jako typická reakce alkanů a jejich mechanismus. Alkeny, geometrická isomerie u alkenů, nomenklatura isomerů (cis-, trans-, E-,Z-). Cahn, Ingold, Prelogova pravidla. Adiční reakce, mechanismus a stereochemie adičních reakcí. Polymerace. Chiralita a symetrie molekul. zobrazování trojrozměrných molekul v rovině (perspektivní vzorce, Fischerova projekce). Enantiomerie (optická isomerie), optická aktivita, specifická rotace a její určování, optická čistota, racemická směs. Zobrazování molekul se dvěma asymetrickými uhlíky. Určování absolutní konfigurace molekul a jejich překreslení do perspektivních vzorců a naopak. Mesoforma. Dieny a polyeny (kumulované, izolované, konjugované). Reakce probíhající na konjugovaných dienech (podmínky pro 1,2- a 1,4- adice a jejich průběh, vysvětlení). Pericyklické reakce-elektrocyclizační reakce, pravidla pro jejich průběh, cykloadiční reakce (Dielsovy-Alderovy), sigmatropní přesmyky. Alkiny a jejich struktura. Vlastnosti trojně vazby, adiční reakce (elektrofilní i nukleofilní reakce), kyselost atomů vodíku vázaných na sp-hybridní uhlík. pKa hodnoty. Aromatický stav a jeho demonstrace (resonanční – delokalizační energie). Benzoidní a nebenzoidní aromáty. Vlastnosti aromatických sloučenin, mechanismus elektrofilní aromatické substituce. Vliv substituce na jádře na vstup elektrofilu na subst. aromát. Empirická Hammettova rovnice, význam konstant r a s. Možnosti nukleofilních substitucí na aromatickém skeletu (SN1, SN2, eliminačně-adiční průběh). Jednotlivé typy SEAr, generace reagentu. Využití rozkladu diazoniových solí pro přípravu jiných derivátů. Adiční a oxidační reakce a jejich podmínky. Reakce na kondensovaných aromatických sloučeninách.					
ORGANICKÁ CHEMIE DERIVÁTŮ					
Halogenderiváty a jejich strukturní typy, rozdělení z lediska reaktivity, vysvětlit. Mechanismus nukleofilních substitucí SN1 a SN2 a stereochemický důsledek průběhu. Eliminační reakce jako konkurenční reakce, jejich průběh a stereochemie, podmínky preference substituce versus eliminace. Hydroxysloučeniny-alkoholy a fenoly. Reaktivita hydroxylové skupiny, kyselost a vliv uhlíkatého zbytku na míru kyselosti. Způsob substituce a eliminace hydroxylové skupiny (vliv uhlíkatého zbytku). Reakce na uhlíkatém zbytku hydroxysloučenin. Oxidace alkoholů. Polyhydroxyderiváty. Chinony, struktura a chemické vlastnosti. Etery – struktura a chemické názvosloví. Fyzikální vlastnosti ve srovnání s alkoholy. Typické chemické vlastnosti, štěpení vazby C-O, tvorba					

peroxidických sloučenin. Epoxidy a cyklické ethery, jejich chemické vlastnosti. Crown ethery a jejich použití. Thioly a sulfidy. Srovnání s kyslíkatými analogy. Produkty oxidace – sulfinové a sulfonové kyseliny a sulfoxidy a sulfony. Sulfonové kyseliny a jejich funkční deriváty (sulfochloridy, estery sulfon. kyselin, sulfonamidy). Estery minerálních látek (sulfáty, nitráty, nitrity, fosfáty). Aminosloučeniny, typy, názvosloví. Základní chem. vlastnosti. Diazotace a využití diazoniových solí. Aminoxidy a jejich využití. Enaminy. Kvarterní amoniové soli, Hoffmanova eliminace. Diazolátky. Diazolkany, diazoestery, diazoketony – jejich příprava a reaktivita. Nitrosloúčeniny, struktura a chem. názvosloví. Vliv nitroskupiny na uhlíkatý zbytek. Příprava nitrolátek (ambidentní ionty). Redukce nitrosloúčenin v závislosti na pH. Azosloúčeniny, azoxyloúčeniny a hydrazolátky. Nitrily a isokyanidy, struktura a příprava. Hydrolyza nitrilů, „isonitrilová“ zkouška. Organokovové sloučeniny a elementorganické sloučeniny, chem. názvosloví. Vliv kovu, polokovu či nekovu na chemické vlastnosti sloučeniny. Základní představitelé organokovových sloučenin a jejich reaktivita a využití v organické syntéze. Karbonylové sloučeniny. Charakterizace karbonylu, nukleofilní adice, reakce s kyslíkatými, dusíkatými a uhlíkatými nukleofily. Vliv karbonylu na uhlíkatý zbytek a využití v organické syntéze. Základní jmenové reakce s využitím karbonylových sloučenin. Oxidace a redukce aldehydů a ketonů. Karboxylové kyseliny, jejich struktura a chemické vlastnosti. Vliv uhlíkatého zbytku a substituce na kyselost. Esterifikace. Funkční deriváty karboxylových kyselin (estery, halogenidy, anhydridy, amidy), jejich příprava a srovnání jejich vlastností a z toho vycházející využití v organické syntéze. Substituční deriváty karboxylových kyselin (hydroxykyseliny-laktony, laktidy, aminokyseliny-laktamy, halogenkyseliny, ketokyseliny). Deriváty kyseliny uhlíčitě, jejich klasifikace a základní typy, jejich reaktivita.

ZVLÁŠTNÍ SKUPINA VÝZNAMNÝCH ORGANICKÝCH MOLEKUL

Isoprenoidy, monoterpeny, seskviterpeny, di-, tri- a tetraterpeny (zvláštní zřetel na karotenoidy).

Sacharidy (aldosy, ketosy, triosy, tetrosy, pentosy, hexosy) jejich názvosloví, cyklické formy, mutarotace. Reaktivita karbonylu a hydroxyskupin. Produkty oxidace a redukce sacharidů, amino a deoxysacharidy. Disacharidy a jejich struktura, redukující a neredukující disacharidy. Polysacharidy – homo a heteropolysacharidy, základní představitelé.

Tuky a jejich struktura, zmýdelnění.

Steroidy. Struktura steroidů, napojení kruhů, číslování, řady steroidů. Steroly (struktura cholesterolu), žlučové kyseliny, steroidní hormony (mužské, ženské-estrogeny a gestageny, zásadní rozdíly ve struktuře a v účincích), kardiotonické steroidy.

HETEROCYKLIČKÉ SLOUČENINY.

Struktura a systematické názvosloví heterocyklických sloučenin. Elektronová struktura a vliv na chemické vlastnosti. Pyrrol, thiofen a furan, srovnání jejich chemických vlastností. Struktura pyrrolových a žlučových barviv. Indol, indoxyl, indigo (struktura). Imidazol, pyrazol, thiazol, oxazol – jejich základní chemická charakteristika. Pyridin, struktura a chemické vlastnosti. Pyridinové soli a pyridinium oxid. Chinolin a isochinolin. Pyryliové soli, flavyliové soli, kumarin, chromon, flavony – struktura a výskyt. Pyrazin, prazimidin (báze nukleových kyselin), pyridazin – struktura. Puriny (základní představitelé, báze nukleových kyselin). Pteriny (struktura).

STRUKTURA A REAKTIVITA

Vztah struktury a její reaktivity. Energie, čas a rozměr v chemii. Hnací síla chemických reakcí. Termodynamika vs. kinetika. Teorie tranzitního stavu. Analýza reakční koordináty. Hammondův a Curtinův-Hammettův princip. Teorie valenčních vazeb a molekulových orbitalů. Orbitalová symetrie a reakční mechanismus.

Aromaticita a antiaromaticita. Aromatické ionty a dipóly.

Efekty substituentů. Vztah pro Gibbsovu energii (LFER). Hammettova rovnice. Taftova rovnice. QSAR.

Interakce mezi s a p systémy - hyperkonjugace. Izotopové efekty.

Konformace acyklických a cyklických uhlovodíků. Vliv heteroatomu na konformační chování. Vliv konformačního chování na reaktivitu. Vztah mezi velikostí kruhu a rychlostními konstantami cyklizačních reakcí.

Přenos protonu. Acidobazické rovnováhy ve vodném i nevodném prostředí a v plynné fázi. Vliv substituentů na sílu Bronstedových kyselin a zásad. Teorie HSAB.

Přenos elektronu. Marcusova teorie. Reakce ve vnitřní a vnější sféře. Přenos elektronu v SN2 a SRN1 reakcích. Solvatace. Chemie v plynné a kapalné fázi. Iontové páry. Hughesův-Ingoldův model.

Katalýza. Katalýza přechodovými kovy; elementární děje v katalytickém cyklu; heterogenní katalýza a s přenosem mezi fázemi.

Efekt magnetického pole (MFE). Magnetický izotopový efekt (MIE). Chemicky indukovaná dynamická jaderná polarizace (CIDNP)

. Fotochemie. Excitace elektromagnetickým zářením. Přechody mezi elektronovými stavy. Zářivé a nezářivé procesy. Základní typy fotochemických transformací.

Neklasické aktivace chemických reakcí: plazmová chemie a interakce gama-záření s organickými látkami.

Jednotlivé typy reakčních mechanismů, jejich průběh a význam pro syntézu. Metody studia mechanismů chemických reakcí. Kinetické metody. Sledování reaktivních meziproductů: izolace, detekce a záchyt.

ORGANICKÁ SYNTÉZA

Syntéza organických molekul s využitím diskonekčního přístupu. Synthony, jejich syntetické ekvivalenty a jejich využití. Ochranné skupiny při syntéze. Syntéza uhlíkatého skeletu lineárního a cyklického, syntéza jednotlivých typů organických funkčních derivátů a jejich vzájemné přeměny. Moderní syntetické metody včetně neklasických jako využití fázového přenosu, micelární katalýzy, reakcí na tuhých nosičích, ultrazvuku a mikrovln. Fotochemické reakce. Využití koordinace a katalýzy přechodovými kovy v organické syntéze.

IDENTIFIKACE ORGANICKÝCH MOLEKUL

Metody klasické analýzy, elementární analýza, důkazy prvků a funkčních skupin. Skeletální analýza. Identifikace derivatizací a s využitím fyzikálních metod strukturní analýzy.

MOLEKULOVÉ MODELOVÁNÍ

Matematické modelování v organické chemii a význam pro chemické reakce a jejich predikci. Transitní stavy reakcí, reakční koordináta, vztahy mezi strukturou a reaktivitou. Hyperplochy potenciální energie a jejich význam pro experimentální chemii. Molekulová mechanika a využití komerčních programů.

Literatura:

- J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers: *Organic Chemistry*, Oxford University Press, New York 2001.
- J. Mc Murry: *Organická chemie*, překlad 6. vydání, VUTium Brno a VŠCHT Praha, 2007.
- E.L. Eliel, S.H. Wilen: *Stereochemistry of Organic Compounds*, John Wiley & Sons, Inc., New York 1994.
- E.L. Eliel: *A Practical Introduction to Stereochemistry*, John Wiley & Sons, Inc., New York 2001.
- G.T.W. Solomons: *Organic chemistry*, 6th ed. New York : John Wiley & Sons, Inc., 1996.
- P. Hrnčiar: *Organická chémia*, 3. vyd. Bratislava : SPN, 1990.
- O.Červinka: *Chemie organických sloučenin*. Díl 1. + 2., 1. vyd., Státní nakladatelství technické literatury, 1985 a 1987.
- M. Potáček, C. Mazal, S. Janků: *Řešené příklady z organické chemie*. 1. vyd. Brno, Masarykova univerzita v Brně, 2000.
- M. Potáček: *Organická chemie pro biology*. 1. vyd. Brno : Vydavatelství Masarykovy univerzity, 1995. 208 s.
- M.B. Smith: *Organic Synthesis*, McGraw-Hill, Inc., New York 1994.
- S. Warren: *Organic Synthesis: The Disconnection Approach*, John Wiley & Sons, Bath, Avon 1984.
- S. Warren: *Workbook for Organic Synthesis: The Disconnection Approach*, John Wiley & Sons, Bath, Avon 1982.
- F.A. Carey, R.J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry, Part B*. New York : Plenum Press, 1990.
- Fuhrhop, Jurgen - Penzlin, Gustav. *Organic Synthesis*. New York : VCH, 1994.
- F. Liška: *Organická syntéza : syntonový přístup*. 1. vyd. Praha : Vysoká škola chemicko-technologická, 1993.
- M. Remko: *Molekulové modelovanie. Princípy a aplikácie*. Bratislava : Slovak Academic Press, 2000.
- F. Jensen: *Introduction to Computational Chemistry*. New York : J. Wiley & Sons Ltd., 1999.
- K.B. Lipkowitz, D.B. Boyd: *Reviews in Computational Chemistry 1-9*. New York : VCH Publishers,

1998.

- W.J. Hehre, A.J. Schusterman, W.W. Huang: *A laboratory book of computational organic chemistry*. Irvine : Wavefunction, Inc., 1996.
- J.B. Foresman, A. Frisch: *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. Pittsburgh : Gaussian, Inc., 1996.
- J. Kováč, A. Krutošiková, R. Kada: *Chémia heterocyklických zlúčenin*. 1. vyd. Bratislava : VEDA vydavateľstvo Slovenskej akadémie vied, 1982.
- J.A. Joule, K. Mills, G.F. Smith: *Heterocyclic chemistry*, 3rd ed. London : Chapman & Hall, 1995.
- A.F. Pozharskii, A. Soladatenkov, A.R. Katritzky: *Heterocycles in life and society : an introduction to heterocyclic chemistry and biochemistry and the role of heterocycles in science, technology, medicine and agriculture*. Chichester : John Wiley & Sons, 1996.
- Fleming: *Hraniční orbitály a reakce v organické chemii*. SNTL, Praha 1983.
- O. Exner: *Korelační vztahy v organické chemii*. SNTL, Praha 1981.
- O. Exner: *Struktura a fyzikální vlastnosti organických sloučenin*. SNTL, Praha 1985.

Fyzikální chemie

I. Rovnováha

Termodynamika

Ideální a reálné plyny. Kritický stav, princip korespondujících stavů. Tepelná rovnováha, teplota, tlak, nultá věta. První věta termodynamiky, vnitřní energie, teplo, práce. Stavové funkce. Standardní stavy.

Termodynamická reverzibilita. Enthalpie, tepelné kapacity za konstantního tlaku a objemu. Termochemie. Hessův zákon. Kirchhoffova rovnice. Jouleův-Thomsonův jev. Kalorimetrie.

Druhá věta termodynamiky. Entropie. Clausiova nerovnost. Účinnost tepelného stroje. Třetí věta. Gibbsova a Helmholtzova funkce. Gibbsova-Helmholtzova rovnice. Maximální práce. Slučovací Gibbsova funkce. Závislost Gibbsovy funkce na tlaku, teplotě a složení. Chemický potenciál. Fugacita.

Fázové rovnováhy

Fázové přeměny čisté látky. Obecná podmínka fázové rovnováhy. Závislost chemického potenciálu čisté látky na teplotě a tlaku. Stabilita fází. Fázový diagram. Clapeyronova a Clausiova-Clapeyronova rovnice. Klasifikace fázových přechodů. Soustavy reagujících složek. Trojsložkové fázové diagramy.

Parciální molární veličiny. Gibbsova-Duhemova rovnice. Raoultův a Henryho zákon. Termodynamika mísení. Aktivita. Kapalné roztoky. Koligativní vlastnosti. Gibbsovo fázové pravidlo. Izobarické fázové diagramy dvousložkových soustav kapalina-kapalina a kapalina-pevná látka. Metody výpočtu fázových rovnováh.

Chemické rovnováhy

Závislost Gibbsovy funkce na rozsahu reakce. Rovnovážná konstanta a její závislost na tlaku a na teplotě. Le Chatelierův princip.

Základní pojmy statistické termodynamiky

Konfigurace a její váha, Boltzmannovo rozdělení, molekulární partiční funkce a její vztah k vnitřní energii a entropii. Kanonický soubor a jeho partiční funkce. Translační, rotační, vibrační a elektronický příspěvek k rozdělovací funkci. Užití statistické termodynamiky.

Rovnovážná elektrochemie

Aktivity iontů v roztocích. Debyeova-Hückelova teorie silných elektrolytů, iontová atmosféra, iontová síla. Součinné rozpustnosti. Galvanické a elektrolytické články. Standardní potenciál elektrody, redoxní schopnost. Druhy elektrod. Nernstova rovnice. Oxidačně-redukční potenciály. Kapalinové spojení a membránový potenciál. Termodynamika elektrochemického článku. pH a jeho měření.

II. Pohyb

Kinetická teorie ideálního plynu

Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení rychlostí, rozdělení energií, mezimolekulární srážky, srážkový průměr, frekvence srážek, střední volná dráha. Tok molekulární veličiny, efúze, difúze, viskozita, tepelná vodivost. 1. a 2. Fickův zákon. Difúzní koeficienty. Stokesův-Einsteinův vztah. Statistická analýza difúze.

Základy nerovnovážné termodynamiky

Produkce entropie, fenomenologické rovnice, Onsagerův princip reciprocity, Sylvestrovy podmínky, Curieův princip symetrie, stacionární stavy a jejich stabilita. Příklady užití lineární nerovnovázné termodynamiky. Nelineární nerovnovázná termodynamika. Oscilující reakce a jejich modely.

Transport iontů a kinetika přenosu elektronu

Faradayovy zákony, vodivost iontů. Specifická a molární vodivost silné a slabé elektrolyty. Kohlrauschův a Ostwaldův zákon. Iontové pohyblivosti, převodová čísla. Elektrochemický potenciál.

Elektrodová dvojrůstava a její modely, proudová hustota a výměnná proudová hustota. Butlerova -Volmerova rovnice. Přepětí a polarizace. Tafelovy souřadnice.

Praktické aspekty elektrochemie

Potenciostatické, galvanostatické a pulzní voltametrické metody, polarografie. Potenciometrie, coulometrie a konduktometrie. Elektrochemické zdroje proudu. Elektrochemické syntézy, akumulátory, koroze.

Chemická dynamika

Rychlost chemických reakcí, rychlostní zákon, rychlostní konstanta a řady reakcí. Poločasy reakcí. Molekularita. Zvratné, následné a paralelní reakce. Teplotní závislost reakční rychlosti. Řetězová reakce, fotochemické reakce, katalýza a autokatalýza. Srážková teorie. Teorie aktivovaného komplexu, reakční koordináta, přechodový stav, aktivační energie. Eyringova rovnice.

Vlastnosti makromolekul, koloidů a fázové rozhraní

Osmóza. Elektroforéza. Polyelektrolyty a dialýza. Viskozita. Povrchová energie, kapilární jevy, praktické aspekty rozdělovacích rovnováh. Struktura a stabilita povrchů. Typy disperzních soustav, elektrická dvojrůstava. Povrchové napětí a povrchový nadbytek. Příprava a vlastnosti koloidů, sedimentace. Koagulace koloidů. Fyzikální a chemická adsorbce. Freundlichova a Langmuirova izoterma. Vícevrstevná adsorbce.

III. Struktura

Základní pojmy kvantové mechaniky

Operátory, vlastní hodnoty a vlastní funkce. Princip neurčitosti. Částice v potenciálové jámě. Harmonický oscilátor, tuhý rotor. Kvantování momentu hybnosti.

Elektronová struktura atomů

Atom vodíku, atomový orbital, atomová spektra. Víceelektronové atomy, výstavbové principy, základy teorie SCF. Základní a excitovaný stav. Russelova-Saundersova vazba. Elektronová konfigurace. Multiplicita.

Elektronová struktura molekul a metody jejího výpočtu

Bornova-Oppenheimerova aproximace. Křivka potenciální energie dvojjátomové molekuly. Překryvový integrál. Teorie valenční vazby - molekula vodíku. Typy vazeb v molekule, hybridizace atomových orbitalů. Jednoelektronové přiblížení, teorie molekulových orbitalů (MO), MO jako lineární kombinace atomových orbitalů (LCAO), Slaterova a Gausova funkce. Vazebné, nevazebné a antivazebné orbitály, význam hraničních orbitalů, interakce orbitalů. Teorie krystalového a ligandového pole. Variační princip, poruchový počet, repulze elektronů, repulzní integrál, Hartreeova - Fockova teorie SCF. Roothanovy rovnice. p - elektronové přiblížení. Hückelova metoda (HMO) a rozšířená Hückelova metoda (EHT). Mullikenova populační analýza. Zavedení spinu do vlnové funkce, spinorbitály. Slaterovy determinanty. Korelační energie, základy metody konfigurační interakce (CI).

Metody počítající se všemi valenčními elektrony (AVE MO). Semiempirické metody MO, zanedbání diferenciálního překryvu (NDO, CNDO, NDDO, MNDO). Neempirické metody (ab initio).

Struktura molekul

Symetrie molekul. Metody studia struktury molekul (difrakční metody, hmotnostní spektrometrie, fotoelektronová spektroskopie, rentgenová fluorescenční analýza, Mössbauerův jev). Molekulová mechanika.

Elektrické, magnetické a optické vlastnosti molekul

Dielektrika v elektrickém poli (rovnice Debyeova a Clausiova-Mossottiova). Dipólový moment molekul. Polarisace dielektrika, permitivita, Kerrův jev. Diamagnetismus a paramagnetismus, permeabilita a susceptibilita. Optická aktivita molekul, Cottonův efekt, magnetická otáčivost. Refrakce molární, atomová a vazebná.

Molekulová spektra

Energetické změny v molekule a typy spekter. Výběrová pravidla. Tranzitní moment a intenzity absorpčních pásů. Rotační a vibrační spektra. Ramanova spektra. Elektronová spektra. Franckův-Condonův princip, elektronové přechody, luminiscenční spektra, spektra cirkulárního dichroizmu. Využití spekter ve strukturní analýze.

Magnetické rezonanční spektroskopie

Hamiltonián částice v magnetickém poli a štěpení energetických hladin, rezonanční podmínka. Nukleární magnetická rezonance: chemický posun a spin-spinové interakce, intenzita signálů. Elektronová spinová rezonance: hyperjemná struktura ESR spekter, g-faktor, šířka a intenzita signálů.

Literatura:

- Atkins P.W.: *Fyzikální chemie*. Slovenská technická univerzita, Bratislava 1999
- Moore W.J.: *Fyzikální chemie*, SNTL, Praha 1979
- Brdička R., Dvořák J.: *Základy fyzikální chemie*. Academia, Praha 1977
- Holba V.: *Fyzikálně-chemické vlastnosti atomů a molekul*. SPN; Bratislava 1980
- Polák R., Zahradník R.: *Kvantová chemie*. SNTL, Praha 1985

Okruhy otázek – volitelné předměty:

Analytická chemie

Analytické reakce

Protolytické, komplexotvorné, srážecí a redoxní rovnováhy, principy, terminologie, termodynamická a kinetická kritéria analytických reakcí, rovnovážné konstanty, celková a rovnovážná koncentrace, bilance rovnovážných koncentrací složek v roztoku, výpočty pH a koncentrací složek v roztoku, vliv prostředí na rovnováhu, podmíněné konstanty, princip logaritmického diagramu rovnováhy, distribuční diagramy, využití chemických reakcí pro kvalitativní analýzu, princip kvalitativní chemické analýzy, selektivita, skupinová a selektivní činidla, maskovací činidla.

Gravimetrie

Teorie vzniku sraženin, pochody na sraženinách; vážení; zpracování sraženin, gravimetrické postupy.

Titrační metody

Principy acidobazických, komplexotvorných, srážecích a redoxních titrací, titrační křivka a její průběh, použití logaritmických diagramů pro popis titračních stanovení, výpočty koncentrací složek v jednotlivých oblastech titrační křivky, tlumivý roztok, indikace ekvivalenčního bodu, indikátory, titrační chyby, základní titrační stanovení kyselin, zásad, kationtů a aniontů.

Elektroanalytické metody

Teroretické základy včetně fyzikálních a fyzikálně-chemických zákonů, instrumentace, parametry analytických metod, aplikace.

Potenciometrické metody: přímá potenciometrie, měření pH a koncentrace iontů, potenciometrická indikace ekvivalenčního bodu titračních stanovení.

Konduktometrické metody: Přímá konduktometrie, konduktometrické titrace.

Elektrogravimetrie, coulometrie: elektrolýza, elektrolytické dělení kovů, coulometrie a coulometrické titrace.

Voltamperometrie, polarografie: Polarografická analýza, adsorptivní rozpouštěcí voltamperometrie, amperometrické, biamperometrické a bipotenciometrické titrace.

Optické analytické metody

Obecné základy: Elektromagnetické záření a jeho interakce s látkou, teoretické základy spektroskopických metod včetně fyzikálních zákonů, instrumentace spektroskopických metod v oblasti molekulových a atomových optických spekter (zavádění vzorku, zdroje záření, atomizační prostředí, kvety a prostředí pro absorpční a luminiscenční měření, monochromatizace a detekce záření), kvalitativní a kvantitativní aspekty, analytické parametry spektrálních metod, aplikace optických metod v chemické a strukturní analýze.

Atomová spektrometrie: emisní, absorpční, fluorescenční spektrometrie v oblasti UV a Vis spekter, spektrometrie v oblasti RTG záření, elektronová spektroskopie.

Molekulová spektrometrie: UV/Vis absorpční a luminiscenční, zákalové metody (turbidimetrie, nefelometrie), infračervená, Ramanova, mikrovlnná, jaderná magnetická rezonance, elektronová paramagnetická rezonance. Refraktometrie, polarimetrie, optická rotační disperze, cirkulární dichroismus.

Analytická hmotnostní spektrometrie

Teoretické základy včetně fyzikálních principů a zákonů, molekulová a atomová hmotnostní spektrometrie, ionizační metody a zdroje, hmotnostní analyzátoři, detektory, kombinované techniky, aplikace.

Lasery v analytické chemii

Princip, druhy laserů, vlastnosti, interakce laserového záření s látkou, přehled využití laserů v analytické chemii.

Separáčn

Přehled: srážení, elektrodepozice, destilace, dialýza, extrakce, chromatografie, elektromigrační metody, frakcionace v toku. Kolonové a planární separační techniky.

Extrakce: extrakce ve fázovém systému kapalina – kapalina, superkritická fluidní extrakce, extrakce na pevné fázi.

Chromatografie: fyzikální a chemické základy a principy chromatografických separací, pojmy a parametry, chromatografie kapalinová a plynová, klasifikace separačních mechanismů, instrumentace pro chromatografické separace, detektory pro chromatografické separace, miniaturizace, kombinované techniky, analytické aplikace.

Elektromigrační metody: principy, pojmy, parametry, zónová elektroforéza, elektroforéza na nosičích, kapilární elektroforéza, izotachoforéza, elektrokinetická micelární chromatografie, elektrochromatografie, instrumentace, detektory, čipová elektroforéza, aplikace elektromigračních metod.

Separace makromolekul: membránové separace (ultrafiltrace, reverzní osmóza, dialýza, elektrodialýza), separace v silovém poli (ultracentrifugace, gelová elektroforéza), gelová permeační chromatografie, frakcionace tokem v poli. Instrumentace.

Základy analýzy organických sloučenin

Kvalitativní a kvantitativní charakteristika, stanovení fyzikálních konstant, elementární analýza, stanovení organických sloučenin na bázi reakcí jejich funkčních skupin, určování čistoty sloučenin, základy přístupu při určování struktury organických sloučenin, stanovení látek ve složitějších směsích.

Analýza materiálů

Analýza silikátů, skel, strusek, cementů, půd, vod, kovů a slitin, keramických materiálů, polovodičů; příprava vzorků k analýze a stanovení toxických prvků v životním prostředí; speciální analýza; metody analýzy povrchů a tenkých vrstev; analýza plynů.

Analýza biologických vzorků

Preanalytická fáze, imunoanalýza, základní principy, přehled moderních metod využívaných v klinické diagnostice (RIA, EIA, ELISA, FIA), enzymové reakce; řízení jakosti v klinické laboratoři; afinitní separace, avidin-biotin; analýza nukleových kyselin, PCR, hybridizace; miniaturizace metod, biočipy, biosenzory, automatizace.

Analytické metody v praxi

Analýza směsí metodou HPLC, použití metody ITP, analýza směsí plynovou chromatografií, stanovení prvků metodou AAS, chronopotenciometrické stanovení, gelová elektroforéza proteinů, analýzy metodou TLC, UV-Vis spektrofotometrie, fluorimetrické stanovení, infračervená spektroskopie v MIR a NIR oblastech, nefelometrické stanovení chloridů.

Statistika a hodnocení analytických výsledků a metod

Metoda plánování pokusů a základní principy optimalizace, základní pojmy analytické metrologie signálu a výsledku, kalibrace, lineární regrese, vývoj analytické metody, odhady metrologických charakteristik analytických výsledků a metod, parametry analytické metody (mez detekce a stanovitelnosti, citlivost, robustnost, přesnost, správnost, aj.), chyby a jejich vztah k parametrům analytických metod, referenční materiály, kruhový test, řízení kvality a akreditace laboratoře, správná laboratorní praxe, validace.

Literatura:

- Sommer L.: *Základy analytické chemie I*, VUTium Brno 1998.
- Sommer L. a kolektiv: *Základy analytické chemie II*, VUTium Brno 2000.
- Kellner R., Mermet J. M., Otto M., Widmer H. M.: *Analytical Chemistry*, Wiley 1998.
- Skoog D. A.: *Analytical chemistry : an introduction*. 7th ed. Fort Worth : Saunders College Publishing, 1999.
- Skoog D. A., Holler, J. F., Nieman T. A. : *Principles of instrumental analysis*. 5th ed. Philadelphia : Saunders College Publishing, 1998.
- Skoog D. A. at. al.: *Fundamentals of analytical chemistry*. 8th ed. Brooks/Cole 2004.

- Harris D. C.: *Quantitative chemical analysis*. 4th ed. New York : W.H. Freeman, 1995.
- Volka K.: *Analytická chemie II*. VSCHT Praha 1995.
- Zýka J. a kol. : *Analytická příručka*. Díl I a II. SNTL Praha, 1988.

Anorganická chemie

Vlastnosti a formy existence hmoty, základní chemické zákony, názvosloví anorganických sloučenin.

Struktura atomů, atomové jádro a jeho stabilita, základní poznatky o radioaktivitě.

Elektronový obal atomu a jeho modely, Schrödingerova rovnice, pojem atomového orbitalu, kvantová čísla a principy výstavby víceelektronových systémů.

Chemická vazba a její typy, vlnově mechanický model kovalentní vazby, hybridizace, model VSEPR, teorie LCAO-MO, energetické diagramy MO jednoduchých molekul. Slabé interakce mezi molekulami (vazba vodíkovým můstkem, van der Waalovy síly. Iontové sloučeniny a iontová vazba. Vazba v tuhých látkách, pásová teorie. Kovy, polovodiče a izolanty.

Základní pojmy koordinační chemie, typy ligandů, názvosloví koordinačních sloučenin, komplexní rovnováhy a stabilita komplexů, mechanismy komplexotvorných reakcí, izomerie v koordinačních sloučeninách.

Symetrie molekul a krystalů a její popis pomocí bodových a prostorových grup symetrie.

Význam izomerie a konformace chemických sloučenin při studiu jejich struktury. Faktory ovlivňující konfiguraci molekul.

Vazba v koordinačních sloučeninách, donorakceptorové vlastnosti ligandů, elektrostatická teorie ligandového pole pro oktaedrické, tetraedrické a čtvercově planární komplexy, vysokospinové a nízko-spinové stavy, metody studia komplexů, jejich magnetické a spektrální vlastnosti.

Spektrální jevy, vznik spekter a principy jejich měření. Molekulová (IČ, Ramanova, elektronová) spektroskopie, luminiscenční spektra.

Magnetické vlastnosti látek, látky dia- a paramagnetické, ferromagnetismus, princip a užití NMR spektroskopie, interpretace jednoduchých spekter. EPR spektroskopie, Mössbauerova spektroskopie, hmotnostní spektroskopie.

Základy experimentální techniky fyzikálních metod studia struktury (spektroskopické, magnetické, rentgenografické, elektrochemické aj.) a možnosti jejich použití v základním i aplikovaném chemickém výzkumu.

Klasifikace prvků, prvky přechodné a nepřechodné, periodický systém a periodičita vlastností. Chemie nepřechodných prvků po skupinách v PS. Přehledné informace o fyzikálně chemických charakteristikách jednotlivých skupin prvků, chemické vlastnosti, příprava a použití jednotlivých prvků a jejich nejdůležitějších sloučenin.

Chemie přechodných prvků podle jednotlivých skupin PS s důrazem na prvky 1. přechodné řady, lanthanoidy a aktinoidy. U technologicky významných prvků a sloučenin principy jejich výroby. Komplexní sloučeniny přechodných prvků.

Trendy moderní anorganické chemie koordinačních i nekovových sloučenin, predikce vlastností nových sloučenin.

Literatura:

- Toužín J., *Stručný přehled chemie prvků*, Skripta MU Brno 2003.
- Greenwood, N. N., Earnshaw, *Chemie prvků I, II*; Informatorium, Praha 1993, ISBN 80-85427-38-9.
- Klikorka J., Hájek B., Votinský J., *Obecná a anorganická chemie*, SNTL - Nakladatelství technické literatury, Praha 1989.
- Gažo J., *Všeobecná a anorganická chemia*, Alfa, Bratislava 1978.
- Housecroft C. E., Sharp A., *Inorganic Chemistry*, Prentice Hall, New York 2001, ISBN 0-582-31080-6.
- Citron F.A., Murillo C., Wilkinson G., Bochmann M., Grimes R., *Advanced Inorganic Chemistry*,

Biochemie

Aminokyseliny, jejich vzorce, acidobazické rovnováhy, izoelektrický bod,

Peptidy, peptidová vazba, primární, sekundární, terciární, kvartérní struktura, metody stanovení primární a sekundární struktury, souvislost mezi primární a sekundární strukturou, vazby stabilizující sekundární strukturu. Metody dělení a izolace bílkovin, chování bílkovin v roztoku (IEC, afinitní chromatografie, GPC, elektroforéza, elektroforéza v SDS, izoelektrická fokusace).

Biochemie hemoglobinu,

Sacharidy, pentózy, hexózy, aldózy, ketózy. Glykosidy, glykosidová vazba a její vlastnosti, disacharidy, homopolysacharidy (škrob, celulóza, glykogen, chitin), heteropolysacharidy, proteoglykany.

Lipidy, acylglyceroly, mastné kyseliny, glycerofosfolipidy, plazmalogeny, sfingolipidy, steroidy, lipoproteiny.

Nukleové kyseliny, baze, DNA, RNA, typy šroubovice DNA, superhelikální struktura, vazby stabilizují sekundární strukturu DNA. Termodynamika enzymových reakcí. makroergické vazby. Reakční kinetika, enzymy jako biokatalyzátory, aktivní místo, katalytické místo, kofaktory, koenzymy a prostetické skupiny, mechanismus působení serinových proteináz, Rovnice Michaelise-Mentenové, metody stanovení K_m a V_L , číslo přeměny, aktivita enzymu, konstanta specifity, Inhibice enzymové reakce, dvousubstrátové reakce, Regulace enzymové aktivity: pH, zymogeny, kovalentní modifikace (fosforylace, adenylylace, disulfidy).

Anaerobní glykolýza, její jednotlivé kroky, energetická bilance. Substrátová fosforylace. Glukoneogeneze. Krebsův cyklus, Pentosafosfátová dráha. Oxidace mastných kyselin, syntéza mastných kyselin, acetogeneze. Odbourávání aminokyselin. Rozdělení a význam proteáz. Vylučování dusíku, močovinový cyklus. Respirační řetězec, jeho komponenty. Oxidační fosforylace, Membránový transport, Fotosyntéza, temnostní fáze, světelná fáze.

Mechanismus svalového stahu, biochemie vidění, přenos nervového vzruchu. Imunochemie. Hormony. Mechanismus funkce některých hormonů (adrenalin, glukagon, prostaglandiny, steroidní hormony, thyroxin, inzulin, rostlinné hormony). Druhý posel. Struktura a funkce G-proteinů. Xenobiochemie, cytochrom P450.

Literatura:

- Voet, D., Voet, J.G. *Biochemie*, Victoria Publishing, 1990.
- Z. Šípál a kol. *Biochemie*, SPN, Praha 1992
- Škárka B., Ferenčík M. *Biochémiá*, Alfa, Bratislava 1987
- Vodrážka, Z. *Biochemie*, 2. vyd., Praha Academia, 1996.

Chemie životního prostředí

Chemie životního prostředí

Vstupy polutantů do jednotlivých složek prostředí, transport prostředím a jeho ovlivnění, transformace polutantů. Vlivy polutantů na živé organismy a mechanismy těchto vlivů. Hodnocení rizik spojených s přítomností polutantů v životním prostředí. Možnosti omezení vstupu polutantů do ŽP a jejich eliminace z prostředí. Metody výzkumu.

Základní skupiny polutantů: oxid siřičitý, oxidy dusíku, oxid uhličitý, freony, atmosférické aerosoly, prach, těžké kovy (rtuť, kadmium, olovo), uhlovodíky a ropné znečištění, pesticidy, polycyklické aromatické uhlovodíky, chlorované polutanty (chlorované fenoly, polychlorované bifenoly, polychlorované dibenzo-p-dioxiny a dibenzofurany)

Znečištění atmosféry

Znečišťující látky, emise, imise, transport a rozptyl škodlivin, zdroje znečištění z hlediska původu, rozložení a času. Primární a sekundární znečištění, hodnoty NPK, K_{max} K_d . Reakce polutantů v atmosféře, fotochemické reakce. Smog oxidační a redukční.

Znečištění hydrosféry

Voda a její funkce, hydrologický cyklus, voda atmosférická, povrchová, podzemní, pitná, užitková a provozní.

Znečištění recipientů, odpadní vody, vody splaškové, průmyslové a komunální. Typy znečištění: ropné látky, detergenty, radioaktivní látky, anorganické a organické polutanty, umělá hnojiva, pesticidy.

Znečištění pedosféry

Přímé a nepřímé znečištění, průmyslová hnojiva, biopesticidy a acidifikace, odpady. Výživa rostlin a hnojení, nadbytek živin a jejich splachy, poměr N, P a K. Chemická ochrana rostlin, neselektivní účinky, vedlejší vlivy a rezidua, přenos v potravních řetězcích. Nechemická ochrana rostlin.

Toxikologie

Toxikologie, polutanty a xenobiotika. Toxicita akutní, chronická, terminální a replikující. Dávka a účinek toxické látky, biotransformace, konjugace, intoxikace a detoxikace, antagonismus a synergismus účinků. Klasifikace: teratogeny a karcinogeny, promotory, přímé a nepřímé karcinogeny, ultimativní a proximativní karcinogeny.

Ekotoxikologie

Limity: nejvyšší přípustná koncentrace, odvozené pracovní limity, primární standard ochrany, emisní standardy, limity pro ovzduší, vodu a půdu, nejvyšší denní příjem škodlivin v potravinách. Antropické činnosti a jejich vliv na jednotlivé biologické systémové úrovně (organismus a jeho části, složky ekosystémů a ekosystémy jako celek).

Literatura:

- Holoubek: *Chemie životního prostředí II - IV - pracovní sešity*
- W. J. Weber: *Environmental Systems and Processes: Principles, Modelling and Design*, Wiley Interscience, 2000.
- Wiliams: *Environmental Chemistry: An Modular Approach*, Wiley Interscience, 2001.
- R. P. Swarzenbach, P. M. Gschwend, D. M. Imboden: *Environmental Organic Chemistry*, Wiley Interscience, 2003.
- J. H. Seinfeld, S. N. Pandis: *Atmospheric Chemistry and Physics: From Pollution to Climate Change*. Wiley Interscience, 1998.
- V. P. Evangelou: *Environmental Soil and Water Chemistry: Principles and Applications*. Wiley Interscience. 1998.

Materiálová chemie

Struktura materiálů:

Chemická vazba v pevných látkách. Krystalová mřížka. Základní strukturní typy. Defekty ve struktuře. Elektronická struktura pevných látek. Fázové a chemické rovnováhy.

Vlastnosti materiálů:

Elektrické vlastnosti materiálů. Mechanické vlastnosti materiálů. Tepelné vlastnosti materiálů. Optické vlastnosti materiálů. Magnetické vlastnosti materiálů.

Charakterizace materiálů:

Principy, techniky a výsledné informace získané základními metodami fyzikálně chemické charakterizace materiálů.

Příprava materiálů:

Základní technologie výroby kovů. Příprava polymerů. Reakce v pevné fázi. Reakce v plynné fázi. Reakce v kapalně fázi.

Příprava materiálů v požadovaném tvaru:

Metody přípravy monokrystalů. Vrstevnaté materiály. Tenké vrstvy a filmy. Vlákna a trubice. Nanočástice. Monomolekulární samouspořádané vrstvy. Nanostrukturní materiály.

Literatura:

- Müller, Ulrich. *Inorganic Structural Chemistry*. 2. vyd. : John Wiley & Sons, 1993.
- Lalena, John N. *Inorganic Materials Synthesis and Fabrication*. Wiley-Interscience, 2008.
- Dann, Sandra E. *Reactions and Characterization of Solids*. RSC, Cambridge, 2000.
- Callister, William D., Jr. *Materials Science and Engineering, An Introduction*. 7. vyd. : John Wiley and Sons, 2007.
- Schubert, Ulrich - Hüsing, Nicola. *Synthesis of Inorganic Materials*. Weinheim : Wiley-VCH, 2000.

- Smart, Lesley - Moore, Elaine. *Solid State Chemistry : An Introduction*. 2. vyd. : CRC Press, 2005.
- West, Anthony R. *Basic Solid State Chemistry*. Second Edition. Chichester : John Wiley & Sons, 1999.
- White, Mary Anne. *Properties of Materials*. Oxford University Press, NY, 1999.
- Lalena, John N. - Cleary, David A. *Principles of Inorganic Materials Design*. John Wiley and Sons, 2010.
- Weller, Mark. *Inorganic Materials Chemistry*. Oxford, UK : Oxford University Press, 1994.

Požadavky na přijímací řízení

Odborný test v rozsahu státní závěrečné zkoušky pro bakalářský studijní obor Chemie na PřF MU (obecná a fyzikální chemie, anorganická chemie, analytická chemie, organická chemie a biochemie) zkoumá přehled uchazeče v základních chemických disciplínách a předpoklady pro studium daného magisterského oboru.

Doporučená literatura pro přípravu k přijímací zkoušce:

- Klikorka J., Hájek B., Votinský J. *Obecná a anorganická chemie*, 2. vyd. Praha : SNTL, 1989.
- Atkins, P. W. *Fyzikální chemie*. 6. vyd. Bratislava : Slovenská technická univerzita v Bratislave, 1999.
- Toužín J. Stručný přehled chemie prvků, Skripta MU Brno, 2001
- Mc Murry J. *Organická chemie*, překlad 6. vydání, VUTium Brno a VŠCHT Praha, 2007.
- Sommer L. *Základy analytické chemie I*, VUTium Brno, 1998.
- Sommer L. a kol. *Základy analytické chemie II*, VUTium Brno, 2000.
- Vodrážka Z. *Biochemie*, 2. vyd., Praha : Academia, 2007.

Další povinnosti / odborná praxe

Studenti musí povinně absolvovat praxi na výzkumném pracovišti nebo ve výrobním podniku mimo MU, zpravidla během prvního semestru studia.

Návrh témat prací a obhájené práce

Témata diplomových prací vypisuje Rada Ústavu chemie na návrh učitelů a zveřejňuje jejich aktuální nabídku v dostatečném počtu. Student si z aktuální nabídky svobodně volí téma diplomové práce. O zadání diplomové práce na zvolené téma žádá student na začátku prvního semestru magisterského studia učitele, který téma navrhl. Zadáním diplomové práce se učitel, který téma vypsal, stává pro studenta, který si ho vybral, vedoucím diplomové práce. Rada Ústavu chemie písemná zadání diplomových prací registruje a archivuje. Student může kterémukoli učiteli těchto pracovišť navrhnout téma své diplomové práce nebo se na tomto tématu dohodnout. V tomto případě navrhuje učitel téma diplomové práce pro konkrétního studenta. Omezením výběru ze zveřejněných témat diplomových prací mohou být jen předem uvedené kapacitní důvody pracoviště, na němž má být diplomová práce zpracována, nebo dřívější obsazení tématu jiným studentem.

Příklady obhájených prací:

Deriváty glykolurilů pro přípravu makrocyclických sloučenin - http://is.muni.cz/th/223301/prif_m/

Tyčinkovité molekuly odvozené z bicyklo[1.1.1]pentanu - http://is.muni.cz/th/106707/prif_m/

Inhibitory proteinových kináz - http://is.muni.cz/th/211937/prif_m/

Syntetické aplikace fotoenolizačních reakcí - http://is.muni.cz/th/150639/prif_m/

Allenylový synthon v syntéze adamantanem substituovaných heterocyklů - http://is.muni.cz/th/223272/prif_m/

Archív závěrečných prací obhájených na Masarykově univerzitě od r. 2006 je na <http://is.muni.cz/thesis/>

Návaznost na další stud. program

Absolvent magisterského studijního programu může pokračovat ve studiu v doktorském studijním programu Chemie na PřF MU, případně na jiných VŠ v ČR i v zahraničí.

C1- Doporučený studijní plán

Vytvoření studijního plánu podle pravidel studijního programu je zákonným právem studenta. Při sestavení studijního plánu musí student dodržet ustanovení Studijního a zkušebního řádu fakulty a Pravidla a podmínky pro vytváření studijního plánu v daném studijním programu. Jako východisko k tvorbě studijního plánu může student využít následujícího doporučeného studijního plánu. Doporučený studijní plán rovnoměrně rozkládá studium do standardní doby dvou let a zaručuje studentům, kteří podle něho studují, splnění povinností nutných k ukončení magisterského studia během standardní doby. Fakultní rozvrh (časová a prostorová alokace výuky předmětů pro daný semestr) je zpracován v návaznosti na doporučené studijní plány.

Povinné předměty a povinně volitelné předměty a jejich návaznosti jsou uvedeny v doporučeném studijním plánu. Student může požádat garanta programu, aby mohl namísto povinného předmětu zapsat předmět analogický obsahem, se stejným ukončením a stejného nebo většího rozsahu. Pokud student úspěšně absolvoval povinný předmět již během bakalářského studia nahradí ho jedním z povinně volitelných předmětů stejného nebo většího rozsahu. Povinné předměty jsou uvedeny v následujícím doporučeném studijním plánu a zahrnují Oborový seminář a Diplomovou práci. Volitelné předměty jsou všechny předměty, které jsou na Přírodovědecké fakultě a ostatních fakultách Masarykovy univerzity v daném období vyučovány a jejichž zápis je pro studenty daného programu povolen. Výběr volitelných předmětů je omezen na povinnost absolvovat minimum 112 kreditů za předměty přírodovědeckých, matematických nebo inženýrských věd, z toho minimálně 100 kreditů za předměty z oboru chemických věd. Volitelné předměty zvláště vhodné pro magisterský studijní program Chemie jsou uvedeny v doporučeném studijním plánu jako doporučené volitelné. Zakončení povinných a povinně volitelných předmětů je zpravidla zkouškou u přednášky, klasifikovaným zápočtem u laboratorního cvičení a zápočtem u semináře. Zakončení volitelných předmětů si student vybírá z možných zakončení předmětu.

Při tvorbě a plnění studijního plánu musí každý student studijního programu dodržet následující pravidla a podmínky:

- Každý akademický rok studia je nutno absolvovat povinný předmět bez kreditového hodnocení C7777 Zacházení s chemickými látkami. V 1. ročníku studia se povinně absolvuje v průběhu podzimního semestru jednorázová dvouhodinová přednáška, v dalších ročnících studia je však již nepovinná. Zápočet z tohoto kurzu se uděluje na základě úspěšného vykonání testu. Zápočet z C7777 je nutnou podmínkou pro vstup do všech předmětů, ve kterých dochází k manipulaci s chemickými látkami (laboratorní cvičení, diplomová práce apod.).
- Musí do termínu konání magisterské státní závěrečné zkoušky zapsat a úspěšně ukončit všechny předměty, které jsou ve studijním programu povinné a respektovat přitom stanovené návaznosti.
- Získat za celé studium absolvováním povinných, povinně volitelných a volitelných předmětů nejméně 120 kreditů.
- Za absolvování povinných a povinně volitelných předmětů musí student získat minimálně 84 kredity.
- Zpracovat diplomovou práci na zadané téma.
- Student musí úspěšně vykonat zkoušku z předmětu JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška před přihlášením k magisterské státní závěrečné zkoušce pokud tuto nevykonal v rámci svého předchozího bakalářského studia.
- Absolvovat úspěšně všechny součásti magisterské státní závěrečné zkoušky. Zkouška sestává z předmětů Organická chemie a Fyzikální chemie a jednoho dalšího předmětu ze skupiny Analytická chemie, Anorganická chemie, Biochemie, Chemie životního prostředí a Materiálová chemie dle výběru. Okruhy témat ke státní závěrečné zkoušce jsou k dispozici na adrese <http://ustavchemie.sci.muni.cz/>

1. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinné předměty					
C5500	Stereochemistry of Organic Compounds	2+2	2/0	zk	Mazal
C5510	Stereochemistry of Organic Compounds-seminar	1	0/1	z	Mazal
C7000	Oborový seminář I	2	0/2	z	Mazal
C7001	Diplomová práce I	3	0/0/3	kz	vedoucí práce
C7410	Struktura a reaktivita	2+2	2/0	zk	Klán
C7415	Struktura a reaktivita - seminář	1	0/1	z	Klán
C7777	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	Příhoda
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	7			
C6180	Pokročilá organická chemie - praktikum	5 kr	0/0/5	kz	Paruch
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	8			
C5060	Metody chemického výzkumu	2+2	2/0	zk	Táborský,Bittová,Preisler
Jarní semestr					
Povinné předměty					
-					
C4450	Organická chemie III - syntéza	2+2	2/0	zk	Paruch
C4455	Organická chemie III - syntéza - seminář	2	0/2	z	Paruch
C6950	Chemická exkurze	0	0/0	z	Janků
C6960	Odborná praxe	0	0/0	z	Šindelář
C8000	Oborový seminář II	2	0/2	z	Mazal
C8001	Diplomová práce II	5	0/0/5	kz	vedoucí práce
C8500	Mechanismy organických reakcí	2+2	2/0	zk	Klán
C8510	Mechanismy organických reakcí - seminář	1	0/1	z	Klán
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	8			
C6250	Metody chemického výzkumu - praktikum	5	0/0/5	kz	Farková,Vrbková
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	4			

2. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinné předměty					
C7777	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	Příhoda
C9000	Oborový seminář III	2	0/2	z	Mazal
C9001	Diplomová práce III	12	0/0/12	kz	vedoucí práce
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	16			
Jarní semestr					
Povinné předměty					
CA000	Oborový seminář IV	2	0/2	z	Mazal
CA001	Diplomová práce IV	20	0/0/20	kz	vedoucí práce
JA002	Pokročilá odborná angličtina - zkouška	2	0/0	zk	Hranáčová
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	6			
Fakulta nabízí také výuku francouzštiny, němčiny, ruštiny a španělštiny.					

Povinně volitelné předměty

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinně volitelné předměty					
C4120	Makromolekulární chemie	2+2	2/0	zk	Šindelář
C5020	Chemická struktura	2+2	2/0	zk	Brož
C5030	Chemická struktura - seminář	1	0/1	z	Brož
C5241	Analytická chemie organických látek	1+2	1/0	zk	Farková,Pazdera,Preisler
C5440	Separční metody	1+2	1/0	zk	Mazal
C6390	Fyzikální metody organické chemie - praktikum	3	0/3	kz	Janků,Literák
C7440	Koordinace a katalýza	1+2	1/0	zk	Pazdera
C7460	Identifikace organických látek - cvičení	1	0/1	z	Pazdera
C7790	Počítačová chemie a molekulové modelování I	1+2	1/0	zk	Koča,Kulhánek
C7800	Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení	1	0/1	z	Koča,Kulhánek
C8780	Organic Photochemistry	2+2	2/0	zk	Klán
C9920	Úvod do kvantové chemie	2+2	2/0	zk	Munzarová
Jarní semestr					
Povinně volitelné předměty					
C4010	Anorganická chemie III	2+2	2/0	zk	Černík,Příhoda
C4015	Anorganická chemie III - seminář	1	0/1	z	Černík,Příhoda
C6410	Organická analýza - praktikum	3	0/0/3	kz	Farková,Pazdera
C8700	Technologie chemických výrob	2+2	2/0	zk	Šindelář
C8860	Syntetické metody "zelené" chemie	2+2	2/0	zk	Pazdera
C8885	Supramolekulární chemie	2+2	2/0	zk	Mazal
C8950	NMR - Strukturní analýza	2+2	2/0	zk	Marek

Doporučené volitelné předměty

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Doporučené volitelné předměty					
C5040	Jaderná chemie	2+2	2/0	zk	Příhoda
C5120	Počítače v chemii a chemometrie	1+1	1/0	k	Farková
C5140	Počítače v chemii a chemometrie - cvičení	2	0/2	z	Farková, Lubal
C5320	Fyzikálně chemické základy NMR	3+2	2/1	zk	Sklenář, Fiala
C5380	Speciální laboratorní technika	1+2	1/0	zk	Černík
C5860	Aplikovaná NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	Brož
C5870	EPR spektroskopie	2+2	2/0	zk	Kubáček
C5880	Základy stereochemie	2+2	2/0	zk	Černík, Toužín
C5885	Základy stereochemie - seminář	2	0/2	z	Černík, Toužín
C5900	Hmotnostní spektrometrie	2+2	2/0	zk	Šimek, Klánová
C5910	Chromatografické metody I.	2+2	2/0	zk	Šimek
C7031	Atomová spektrometrie	2+2	2/0	zk	Kanický, Otruba
C7050	Elektroanalytické metody	2+2	2/0	zk	Trnková
C7110	Výpočetní technika - aplikace	1	0/1	z	Farková
C7670	Izotopové metody	1+2	1/0	zk	Křivohlávek
C7680	Izotopové metody - laboratorní cvičení	3	0/2	kz	Křivohlávek
C7700	Chemie nekovů	2+2	2/0	zk	Černík
C7895	Hmotnostní spektrometrie biomolekul	2+2	2/0	zk	Preisler
C7995	Advanced Methods of Biomolecular NMR	2+2	2	zk	Fiala, Židek
C7999	Advanced Methods of NMR Spectroscopy	2+1	0/0/2	zk	
C8102	Speciální metody - laboratorní cvičení	5	0/0/5	kz	Farková, Hrdlička, Lubal
C8840	Chemie makrocyclických sloučenin	2+2	2/0	zk	Lubal
C9500	Užitá chemie	2+1	2/0	k	Pazdera
Jarní semestr					
Doporučené volitelné předměty					
C4120	Makromolekulární chemie	2+2	2/0	zk	Šindelář
C6010	Toxikologie	1+2	1/0	zk	Picka
C6020	Jaderná chemie - laboratorní cvičení	3	0/0/3	kz	Křivohlávek
C6250	Metody chemického výzkumu - praktikum	5	0/0/5	kz	Farková, Vrbková
C6310	Symetrie molekul	2+2	2/0	zk	Kubáček
C6320	Chemická kinetika	2+2	2/0	zk	Sopoušek
C6330	Chemická kinetika - seminář	1	0/1	z	Sopoušek
C6740	Elektrické vlastnosti molekul	2+2	2/0	zk	Trnková
C6770	NMR Spectroscopy of Biomolecules	2+2	2/0	zk	Židek, Fiala
C6790	Hmotnostní spektrometrie	2+2	2/0	zk	Brož, Vřešťál
C6800	Multinukleární NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	Pinkas
C6815	Struktura a vlastnosti polymerů	2+2	2/0	zk	Šindelář

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
C6830	Radioekologie	1+2	1/0	zk	Křivohlávek
C6850	Chromatografické metody II	2+2	2/0	zk	Šimek
C6860	Moderní metody analýzy organických polutantů	2+2	2/0	zk	Klánová
C7041	Molekulová spektrometrie	2+2	2/0	zk	Kanický, Tábořský
C7670	Izotopové metody	1+2	1/0	zk	Křivohlávek
C7680	Izotopové metody - laboratorní cvičení	3	0/2	kz	Křivohlávek
C8855	Počítačová chemie a molekulové modelování II	2	1/0	k	Koča, Kříž
C8856	Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení	1	0/1	z	Koča, Kříž

E – Personální zabezpečení studijního programu (studijního oboru) – souhrnné údaje											
Vysoká škola	Masarykova univerzita										
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta										
Název studijního programu	Chemie										
Název studijního oboru	společné pro všechny obory										
Název pracoviště:	celkem	prof. celkem	přepoč. počet p.	doc. celkem	přepoč. počet d.	odb. as. celkem	z toho s věd. hod.	lektoři	asistenti	vědečtí pracov.	THP
Ústav chemie	73	10	7,775	12	10,100	5		6	0	4	36
RECETOX	76	4	2,750	6	5,300	6		0	0	1	59

F – Související vědecká, výzkumná, vývojová, umělecká a další tvůrčí činnost

Vysoká škola	Masarykova univerzita
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta
Název studijního programu	Chemie
Název studijního oboru	společné pro všechny obory

Informace o tvůrčí činnosti vysoké školy související se studijním oborem (studijním program)

Ústav chemie (ÚCh) je nositelem projektu OP VK v oblasti podpory 2.2 – Vysokoškolské vzdělávání CZ.1.07/2.2.00/07.0436 „Inovace vzdělávání v chemii na PřF MU“ (období řešení 5/2009 – 5/2012), v rámci něhož jsou ve spolupráci s partnerskými organizacemi a potenciálními zaměstnavateli realizovány změny v nabídce dosavadních i nově vzniklých kurzů. Ústav chemie se dále účastní projektu OP VK v oblasti podpory 2.4 – Partnerství a sítě CZ.1.07/2.4.00/12.0036 „Platforma pro památkovou péči, restaurování a obnovu“ (období řešení 1/2011 - 12/2013), projektu OP VK v oblasti podpory 2.2 – Vysokoškolské vzdělávání CZ.1.07/2.2.00/15.0201 „Vzdělávání budoucích středoškolských učitelů přírodních věd a informatiky“ (období řešení 10/2010 - 9/2013) a projektu OP VK v oblasti podpory 1.3 – Další vzdělávání pracovníků škol a školských zařízení CZ.1.07/1.3.10/02.0024 „Modulární systém dalšího vzdělávání pedagogických pracovníků JmK v přírodních vědách a informatice“ (období řešení 3/2010 - 6/2012). Pracovníci Ústavu chemie se dále podílejí na řešení výzkumného záměru MSM0021622410 „Fyzikální a chemické vlastnosti pokročilých materiálů a struktur“ (1/2005 – 12/2011) a dalších projektů podporovaných GAČR a MŠMT, jejichž příklady jsou uvedeny níže.

Centrum pro výzkum toxických látek v prostředí (RECETOX) je nositelem projektu OP VK v oblasti podpory 2.2 – Vysokoškolské vzdělávání Inovace a rozšíření výuky zaměřené na problematiku životního prostředí na PřF MU (RECETOX EDUCATION) (Projekt CZ.1.07/2.2.00/15.0213) a projektu OP VK 2.3 Podpora odborníků a mezinárodního networkingu v oblastech environmentálního výzkumu v ČR (RECETOX NETWORKING) (Projekt CZ.1.07/2.3.00/20.0053). Dalé je řešitelem projektu CETOCOEN - projekt vybudování Centra pro výzkum toxických látek v prostředí. Tvůrčí činnost je dlouhodobě rozvíjena v rámci výzkumného záměru INCHEMBIOL - Interakce mezi chemickými látkami, prostředím a biologickými systémy a jejich důsledky na globální, regionální a lokální úrovni (výzkumný záměr MSM0021622412).

Evidence aktuálních projektů a projektů z předchozích období je přístupná na adresách:

http://www.muni.cz/sci/313010/projects?from_record=1

http://www.muni.cz/sci/313060/projects?from_record=1

Přehled řešených grantů a projektů (závazné jen pro magisterské programy)

Pracoviště	Názvy grantů a projektů získaných pro vědeckou, výzkumnou, uměleckou a další tvůrčí činnost v oboru	Zdroj	Období
ÚCh	Analýza biomolekul hmotnostní spektrometrií s laserovou desorpční/ionizační za účasti nanomateriálů (GCP206/10/J012)	GAČR	2010 - 2012
ÚCh	Oxidy a fosforečnany kovů jako formy jaderného odpadu: studium sonochemického srážení, tepelných přeměn a rozpustnosti (GAP207/11/0555)	GAČR	2011 - 2013
RECETOX	Zdravotní rizika v Arktidě: Vliv změn v cyklech kontaminantů způsobených změnami klimatu na zdravotní rizika v Arktidě a Evropě (ArcRisk)	EU	2009-2013
RECETOX	Dlouhodobý monitoring perzistentních organických polutantů ve volném ovzduší Afriky.	EU	2010-2012
RECETOX	MonAirNet - Posílení příhraniční spolupráce mezi ČR a Rakouskem v oblasti hodnocení zatížení volného ovzduší POPs daného regionu.	EU	2010-2012
RECETOX	AirToxPM - Komplexní charakterizace prachových frakcí ve volném ovzduší	EU	2007-2011

I – Uskutečňování akreditovaného stud. programu mimo sídlo vysoké školy

Vysoká škola	Masarykova univerzita
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta
Název studijního programu	Chemie
Název instituce nebo pobočky VŠ, kde probíhá výuka SP mimo sídlo VŠ nebo fakulty	
Výuka veškerých programů je uskutečňována výhradně v sídle vysoké školy.	

D – Charakteristika studijních předmětů

CA000 Oborový seminář IV

Vyučující: [doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.](#)

Rozsah: 0/2/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Zprávy o postupu a prezentace výsledků samostatných projektů, diplomových a disertačních prací. Informace z literatury o nejnovějších výsledcích a vývoji v oboru. Referátové zpracování přehledných článků. Studenti se naučí správně interpretovat vědecké poznatky z literatury a prezentovat výsledky vlastní výzkumné práce.

Osnova:

- Příspěvky studentů, vyučujících a externistů.

Výukové metody: Diskuse, četba, prezentace, skupinové projekty, domácí úlohy atd.

Metody hodnocení: Zápočet je udělen za účast na semináři a aktivní vystoupení studenta.

Literatura:

- Current journals specified by the lecturers
- *Angewandte Chemie International Edition*. 2009. ISSN 1433-7851. info
- *Journal of the American Chemical Society*. 2009. ISSN 0002-7863. info

CA001 Diplomová práce IV

Vyučující: vedoucí práce

Rozsah: 0/0/20. 20 kr. Doporučované ukončení: kz. Jiná možná ukončení: z.

Cíle předmětu: Předmět diplomová práce je koncipován jako kurz motivující studenta ke zpracování výsledků vlastního výzkumu ve formě diplomové práce splňující veškeré požadavky na ni kladené. Absolvování tohoto kurzu zajistí, že student odevzdá diplomovou práci odsouhlasenou vedoucím. Student by tak měl být připraven k úspěšné obhajobě práce. Navíc student hlouběji porozumí výzkumným metodám používaným v dané oblasti, bude schopen samostatné výzkumné činnosti a bude si uvědomovat etické aspekty vědecké práce.

Osnova:

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

Výukové metody: Vlastní rešeršní činnost, výzkumná práce v laboratoři, konzultace s vedoucím.

Metody hodnocení: Zápočet je udělený za odevzdání práce se souhlasem vedoucího.

Literatura:

- Eco, Umberto - Seidl, Ivan. *Jak napsat diplomovou práci*. Olomouc : Votobia, 1997. 271 s. ISBN 80-7198-173-7. info
- Literatura dle doporučení vedoucího diplomové práce (Literature according to the recommendation of the thesis supervisor)

C4010 Anorganická chemie III

Vyučující: [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [prof. RNDr. Jiří Příhoda CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Přednáška doplňuje oba základní kurzy C1061 a C2062 o některá zajímavá témata moderní anorganické chemie a je rozdělena na dvě hlavní části. Prvá se zabývá strukturou a vlastnostmi allotropů prvků hlavních podskupin, homopolyatomičkových kationtů a aniontů nekovů a chemií klecovitých molekul a klastrů vytvářených P-prvky, včetně hydridů boru a Zintlových iontů. Struktura a vazba v elektronově deficitních klastrech je pojednána z hlediska teorie PSEPT. Druhá část je věnována koordinační chemii důležitých prvků periodického systému. Zabývá se zejména metodami komplexotvorných rovnováh, mechanismy tvorby komplexů ve vodné fázi a způsoby stanovení konstant stability. Zahrnuto je rovněž využití komplexotvorných reakcí pro praktické účely. Hlavní cíle přednášky jsou následující: - poskytnout studentům stručný přehled vybraných témat z chemie klastrů vytvářených p-prvky a chemie koordinačních sloučenin. - porozumět struktuře a vazbě jak v "elektronově přesných" tak i v "elektronově deficitních" klastrech. - osvojit si Wadeho pravidla i

Lipscombova pravidla styx, jakož i jejich využití k předpovědi molekulových struktur boranů, heteroboranů a Zintlových iontů.

Osnova:

- 1. Koncepce periodicity a fyzikální a chemické vlastnosti prvků. Allotropy a polymorfní formy prvků: bor, fosfor a sira. Chemická syntéza allotropů síry. 2. Struktura a vlastnosti allotropů uhlíku: diamant, grafit a fullereny. Vazba v molekulách fullerenu a jejich chemická reaktivita. Endohedrál ní sloučeniny fullerenu, nanotrubic. Chemické vlastnosti grafitu. Interkaláty grafitu. 3. Klastry vytvářené p-prvky a jejich mateřské polyedry. Lokalizovaná a delokalizovaná vazba v polyedrických klecovitých molekulách. Donor-akceptorová vazba v klastrech. Vazba v klastrech s nedostatkem elektronů. 4. Klasifikace a názvosloví neutrálních boranů a hydridoborátových dianiontů. Karborany a jiné heteroborany. Halogenidy boru s uzavřeným deltaedrickým skeletem B_n. 5. Vazba v boranech. Třístředové dvouelektronové vazby B-H-B a BBB. Lipscombova pravidla styx. Teorie elektronových párů v polyedrických skeletech (PSEPT) a předpověď struktury boranového klastru. 6. Metody syntézy klastrů. Borany a closo-hydridoborátové anionty, heteroborany s p-prvky, nižší halogenidy boru s polyedrickou strukturou. Kubany a klastry typu adamantanu. Chalkogenidy fosforu a nitridy síry. 7. Homopolyatomické kationty a anionty nekovů. Syntéza polyatomických kationtů chalkogenů a halogenů v superacidních prostředích. Chemie Zintlových fází. PSEPT a struktura Zintlových iontů. 8. Ionty v roztocích: solvatační vlastnosti rozpouštědel, solvatační číslo, reakce spojené s přítomností iontu v roztoku, hydrolýza, polymerizace apod. 9. Základy koordinační chemie: pojem koordinační částice, centrální atom, ligandy, vlastnosti ligandů, koordinační číslo a koordinační polyedry, stabilita komplexu, mechanismy uplatňující se při tvorbě komplexních sloučenin, trans-efekt, izomerie komplexních sloučenin. 10. Typy komplexotvorných činidel: chelátotvorná činidla, činidla vhodná pro tvorbu iontových asociátů, organofosforová činidla. 11. Metody studia komplexních sloučenin: spektrofotometrické, extrakční, ionexové aj. 12. Tvorba chelátů a iontových asociátů, teorie extrakce chelátů a iontových asociátů, vlivy prostředí na extrakci komplexních sloučenin (směrnice analýza), substochiometrická extrakce, izotopické zředování. 13. Komplexy nekovových prvků. 14. Komplexy přechodných a nepřechodných kovů.

Výukové metody: Přednáška

Metody hodnocení: Ústní zkouška

Literatura:

- Housecroft, Catherine E. *Cluster molecules of the p-block elements*. 1st ed. Oxford : Oxford University Press, 1994. 91 s. ISBN 0-19-855698-5. info
- Greenwood, N. N. - Earnshaw, Alan. *Chemistry of the elements*. 2nd ed. Oxford : Butterworth-Heinemann, 1997. xxii, 1341. ISBN 0-7506-3365-4. info
- Taylor, Roger. *Lecture notes on fullerene chemistry*. London : Imperial College Press, 1999. 268 s. ISBN 1-86094-109-5. info
- Gokel, George W. *Crown ethers and cryptands*. Cambridge : The Royal Society of Chemistry, 1991. xii, 190 s. ISBN 0-85186-996-3. info
- Starý, Jiří. *Separáční metody v radiochemii*. Praha : Academia, 1975. 400 s. info
- Burgess, John. *Metal ions in solution*. : John Wiley & Sons, 1978. 481 s. ISBN 0-470-26293-1. info
- Sary, I. *Ekstrakcija chelátov : The solvent extraction of metal chelates (Orig.)*. Moskva : Mir, 1966. 392 s. info

C4015 Anorganická chemie III - seminář

Vyučující: [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [prof. RNDr. Jiří Příhoda CSc.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: V semináři jsou v prvé části diskutovány a řešeny vybrané problémy týkající se strukturní chemie a vazby v homopolyatomických kationtech, Zintlových iontech a jiných klastrech prvků hlavních podskupin periodického systému. Druhá část semináře je věnována procvičování problematiky přednášky Anorganická chemie III pro oblast komplexních sloučenin, extrakční chemie a vybraných radioanalytických metod. Cíl kurzu: - seznámit studenty s chemickou vazbou a geometrií klecovitých molekul a klastrů nalezených u prvků i v chemických sloučeninách; - podporovat dovednost studentů ve využití Wadeho a Lipscombových pravidel k předpovědi struktury klastrů prvků hlavních podskupin a rozvíjet jejich schopnost objasnit pozorované struktury analýzou počtu valenčních elektronů podle metody PSEPT.

Osnova:

- Obsah tohoto teoretického kurzu odpovídá sylabu přednášky Anorganická chemie III.

Výukové metody: Seminární forma výuky. Studenti referují o vybraných tématech, jsou diskutovány a řešeny zadané problémy.

Metody hodnocení: Ukončeno zápočtem.

Literatura:

- Housecroft, Catherine E. *Cluster molecules of the p-block elements*. 1st ed. Oxford : Oxford University Press, 1994. 91 s. ISBN 0-19-855698-5. info
- Greenwood, N. N. - Earnshaw, Alan. *Chemistry of the elements*. 2nd ed. Oxford : Butterworth-Heinemann, 1997. xxii, 1341. ISBN 0-7506-3365-4. info
- Stary, I. *Ekstrakcija chelatov : The solvent extraction of metal chelates (Orig.)*. Moskva : Mir, 1966. 392 s. info

C4120 Makromolekulární chemie

Vyučující: [doc. Ing. Vladimír Šindelář Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Předmět seznamuje se základními principy makromolekulární chemie. Hlavní pozornost je věnována následujícím tématům: struktura a názvosloví polymerů, molekulární hmotnost a distribuce makromolekul, vztahy mezi strukturou polymerů a jejich vlastnostmi, termodynamické podmínky vzniku makromolekul; typy polymerizačních reakcí, kinetika a způsoby přípravy polymerů.

Osnova:

- 1. Úvod, základní pojmy, historie, nomenklatura polymerů, směry ve vývoji makromolekulární chemie, podmínky pro vznik makromolekuly, konstituce, konfigurace a konformace polymerů. 2. Charakteristické vlastnosti makromolekulárních látek, číselně a hmotnostně střední molekulová hmotnost, polymerizační stupeň, distribuční křivka, metody měření molekulových hmotností polymerů. 3. Termické chování polymerů, teplota skelného přechodu, fyzikální a skupenské stavy, viskoelastičita, morfologie polymerů, amorfní a krystalické fáze a metody jejich stanovení. 4. Syntéza makromolekulárních látek, podmínky vzniku makromolekuly, funkčnost monomerů, základní charakteristiky stupňových a řetězových polymerizací, jejich odlišnosti, příklady typických zástupců polymerizačních reakcí. 5. Polykondenzace, mechanismus, destrukční procesy, distribuce molárních hmotností, kinetika polykondenzace, rovnováhy, způsoby provádění polykondenzace, polykondenzace vícefunkčních látek. 6. Polymery připravované polykondenzací: polyestery, polyamidy, fenol-, močovino- a melamino formaldehydové pryskyřice, polysiloxany. Polyadice, mechanismus, charakteristické znaky, polymery připravované polyadící: polyurethany, epoxidové pryskyřice. 7. Radikálové polymerizace, mechanismus, iniciace, propagace, terminace, přenosové reakce, inhibitory a retardéry, kinetika radikálové polymerizace, gelový efekt, kopolymerizace. 8. Způsoby provádění řetězových polymerizací: bloková, roztoková, suspenzní a emulzní polymerizace. 9. Kationtová a aniontová polymerizace, iniciátory, růst řetězce, terminace a přenos, živé polymery, iontové kopolymerizace, koordinační stereospecifické polymerizace, Ziegler-Nattovy katalyzátory. 10. Polymery řetězovou polymerizací: polyethylen, polypropylen, polystyren, polyvinylchlorid, polytetrafluoroethylen, polyvinylalkohol, polyvinylacetát, polymethylmethakrylát, atd.(postup výroby, vlastnosti a aplikace). 11. Kopolymery: butadien-styrenový kaučuk, butadienakrylonitrilový kaučuk, houževnatý polystyren, kopolymery styren-akrylonitril, ABS, (postup výroby, vlastnosti a aplikace). 12. Přírodní polymery: polysacharidy: celulóza, škrob, hemicelulózy, lignin, polypreny přírodní kaučuk, gutaperča, polypeptidy typu bílkovin. 13. Speciální polymery, tepelně odolné polymery, elektrovedivé polymery, polymery využívané v lékařství, dendrimery, perspektiva využití polymerů. 14. Souhrn

Výukové metody: Přednáška

Metody hodnocení: Písemná a ústní zkouška

Literatura:

- I.Prokopová, Makromolekulární chemie, VSCHT Praha, 2004.
- L. Mleziva, J. Kálal, Základy makromolekulární chemie. SNTL/Alfa, 1986.
- Elias, Hans-George. *Macromolecules*. Weinheim : Wiley-VCH, 2005. xxxii, 666. ISBN 3-527-31172-6. info
- *Macromolecules*. Edited by Hans-Georg Elias. Weinheim : Wiley-VCH, 2007. xxviii, 63. ISBN 978-3-527-31173. info
- Elias, Hans-Georg. *Macromolecules*. Weinheim : Wiley-VCH, 2009. xxxiv, 693. ISBN 978-3-527-31175. info

- Elias, Hans-Georg. *Macromolecules*. Weinheim : Wiley-VCH, 2008. xxxiv, 665. ISBN 978-3-527-31174. info
- M.-P. Stevens, *Polymer Chemistry: An Introduction*, Oxford University Press 1999.
- M. Kučera, *Makromolekulární chemie. Synthesa makromolekul*, VUTIUM, VUT Brno 1999.
- H.-G. Elias, *An Introduction to Polymer Science*, Weinheim 1997.
- P. Munk, *Introduction to Macromolecular Science*, John Wiley&Sons, 1989.

C4450 Organická chemie III - syntéza

Vyučující: [Mgr. Kamil Paruch PhD.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Obsah předmětu navazuje na základní přednášky Organická chemie I (C2021) a Organická chemie II (C3050) a jeho cílem je poskytnout ucelený přehled moderních syntetických metod rutinně používaných v laboratoři i průmyslu. Na konci tohoto kurzu budou studenti schopni navrhnout proveditelnou syntézu organických molekul s využitím tradičních i moderních metod organické syntézy.

Osnova:

- 1. Obecné pojmy a principy. Opakování již nabytých znalostí. Hammondův, Curtinův-Hammettův princip, princip mikroskopické reverzibility, Baldwinova pravidla, kinetický a termodynamický průběh reakcí, faktory ovlivňující selektivitu reakcí. Souvislosti a aplikaci těchto pojmů s organickou syntézou.
- 2. Chemie enolátů. Tvorba enolátů a selektivita jejich přípravy. Různé metody přípravy enolátů. Využití enolátů v organické syntéze. Stereoselektivní reakce enolátů.
- 3. Chemie enolátů. Aldolová reakce, Claisenova reakce. Stereoselektivní reakce. Dvojitá stereodiferenciace. Wittigova a Petersenova reakce. Chemie ylidů síry. Coreyho-Čajkovského reakce.
- 4. Selektivní nukleofilní adice na karbonylovou skupinu. Cramův, Karabatsosův, Felkinův-Ahnův a Heathcockův model.
- 5. Vzájemné přeměny funkčních skupin.
- 6. Vzájemné přeměny funkčních skupin. Mitsunobuho, Eschenmoserova reakce, hydroborace. Jodolaktonizace.
- 7. Oxidace. Swernova, Dessova-Martinova Oppenauerova, Sharplessova a Jacobsenova oxidace. Syntetické aplikace. Epoxidace, dihydroxylace, příprava vicinálních aminoalkoholů.
- 8. Redukce. Shapirova, Birchova redukce. Katalytická hydrogenace, reakce diimidu, hydrosilylace.
- 9. Přesmyky, pericyklické reakce. Copeho, Claisenův přesmyk. Dielsovy-Alderovy, nové reakce a jejich hetero modifikace.
- 10. Reakce organokovových činidel. Grignardova činidla, Stilleho, Suzukiho a McMurryho reakce, konjugované adice organokuprátů, reakce organozinečnatých činidel. Reakce s účastí paladia.
- 11. Multikomponentní reakce. Mannichova, Streckerova, Ugiho reakce a jejich stereoselektivní příklady.
- 12. Příklady vícestupňových syntéz. Rozbor klasických schemat (Corey, Woodward, Nicolaue). Příprava syntetického projektu.
- 13. Chránící skupiny a jejich aplikace.
- 14. Moderní organická syntéza. Kombinatoriální chemie.

Výukové metody: teoretická příprava včetně designu prakticky proveditelných organických syntéz

Metody hodnocení: Přednáška s písemným testem doplněným ústní zkouškou.

Literatura:

- Carey, Francis A. - Sundberg, Richard J. *Advanced Organic Chemistry, Part B*. New York : Plenum Press, 1990. 800 s. info
- Smith, Michael B. *Organic synthesis*. New York : McGraw-Hill, 1994. xxx, 1595. ISBN 0-07-048716-2. info
- Fuhrhop, Jurgen - Penzlin, Gustav. *Organic Synthesis*. New York : VCH, 1994. 432 s. info
- Liška, František. *Organická syntéza : syntonový přístup*. 1. vyd. Praha : Vysoká škola chemicko-technologická, 1993. 339 s. ISBN 80-7080-176-. info

C4455 Organická chemie III - syntéza - seminář

Vyučující: [Mgr. Kamil Paruch PhD.](#)

Rozsah: 0/2/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Předmět logicky navazuje na základní předměty Organická chemie I (C2021), Organická chemie II(C3050) a Organická chemie III (C4450). Cílem předmětu je procvičit probíranou látku předmětu C4450 na vybraných příkladech.

Osnova:

- 1.Obecné pojmy a principy. Opakování již nabytých znalostí.Hammondův, Curtinův-Hammettův princip, princip mikroskopické reverzibility, Baldwinova pravidla, kinetický a termodynamický průběh reakcí, faktory ovlivňující selektivitu reakcí. Souvislosti a aplikaci těchto pojmů s organickou syntézou. 2.Chemie enolátů. Tvorba enolátů a selektivita jejich přípravy. Různé metody přípravy enolátů. Využití enolátů v organické syntéze. Stereoselektivní reakce enolátů. 3.Chemie enolátů. Aldolová reakce, Claisenova reakce.Stereoselektivní reakce. Dvojitá stereodiferenciace. Wittigova a Petersenova reakce. Chemie ylidů síry. Coreyho-Čajkovského reakce. 4.Selektivní nukleofilní adice na karbonylovou skupinu. Cramův, Karabatsosův, Felkinův-Ahnův a Heathcockův model. 5.Vzájemné přeměny funkčních skupin. 6.Vzájemné přeměny funkčních skupin. Mitsunobuho, Eschenmoserova reakce, hydroborace. Jodolaktonizace. 7.Oxidace. Swernova, Dessova-Martinova Oppenaurowa, Sharplessova a Jacobsenova oxidace. Syntetické aplikace. Epoxidace, dihydroxylace, příprava vicinálních aminoalkoholů. 8.Redukce. Shapirova, Birchova redukce. Katalytická hydrogenace, reakce diimidu, hydrosilylace. 9.Přesmyky, pericyklické reakce. Copeho, Claisenův přesmyk. Dielsovy-Alderovy, enové reakce a jejich hetero modifikace. 10.Reakce organokovových činidel. Grignardova činidla, Stilleho, Suzukiho a McMurryho reakce, konjugované adice organokuprátů, reakce organozinečnatých činidel. Reakce s účastí paladia. 11.Multikomponentní reakce. Mannichova, Streckerova, Ugiho reakce a jejich stereoselektivní příklady. 12.Příklady vícestupňových syntéz. Rozbor klasických schemat (Corey, Woodward, Nicolaue). Příprava syntetického projektu. 13.Chránící skupiny a jejich aplikace. 14.Moderní organická syntéza. Kombinatoriální chemie.

Výukové metody: seminář; praktické procvičování syntetických strategií

Metody hodnocení: Seminář se zápočtem.

Literatura:

- Carey, Francis A. - Sundberg, Richard J. *Advanced Organic Chemistry, Part B*. New York : Plenum Press, 1990. 800 s. info
- Smith, Michael B. *Organic synthesis*. New York : McGraw-Hill, 1994. xxx, 1595. ISBN 0-07-048716-2. info
- Fuhrhop, Jurgen - Penzlin, Gustav. *Organic Synthesis*. New York : VCH, 1994. 432 s. info
- Liška, František. *Organická syntéza : syntonový přístup*. 1. vyd. Praha : Vysoká škola chemicko-technologická, 1993. 339 s. ISBN 80-7080-176-. info

C5020 Chemická struktura

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Brož Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Na konci kurzu bude student schopen použít znalostí základních spektroskopických metod (hmotnostní spektrometrie, difrakční analýza, IČ spektroskopie, NMR atd.) k identifikaci chemické struktury. Bude schopen navrhnout vhodný postup ke studiu chemických látek a interpretovat získané údaje.

Osnova:

- 1. Difrakce elektronů a rtg. záření . Elektrony jako částice i záření, kvantová čísla, difrakce na souboru rovin (Huygensova a Ewaldova konstrukce), přímá a reciproká mřížka, interference (Laueho a Braggova metoda), radiální distribuční funkce (Wierlova rovnice). 2. Absorpce elektronů a gama záření. Hmotnostní spektrometrie (metody ionizace, rozlišení a detekce, skupina molekulového píku, hlavní typy fragmentace). Moessbauerova spektroskopie (isotopový posun, kvadrupolové štěpení). 3. Fotoelektronová spektroskopie. Absorpce rtg. fotonu (XPS, ESCA), elektronu (Auger) a UV kvanta (UPS). Rtg. fluorescence. 4. Absorpce UV a vis. záření. Elektronová spektroskopie, (Franckův-Condonův princip, vibrační a rotační struktura energetických diagramů) termická relaxace, fluorescence, fosforescence (typy elektronových přechodů, částice v jednorozměrné potenciálové jámě, chromofory, auxochromy, posuny absorpcí vnějšími a vnitřními vlivy). Využití elektronové spektroskopie ve strukturní a kvantitativní analýze (Lambertův-Beerův zákon). 5. Molekuly v elektrickém poli (polarizovatelnost, indukovaný a permanentní dipolový moment, permitivita dielektrika). Polarizace indukovaná a orientační, Clausius-Mossottiho a Debyeova rovnice. Měření dipolových momentů (Halverstadt-Kumlerova metoda, Gugenheim-Smithova metoda). Index lomu a molární refrakce. 6. Molekuly v elektrickém poli světelné vlny. Rayleighův a Ramanův rozptyl,

Ramanova spektroskopie (anisotropie polarizovatelnosti, depolarizace, Stokesovy a antistokesovy přechody, Ramanova spektra vibrační a rotační). 7. Absorpce IR a MW záření. IR spektra vibrační (harmonický a anharmonický oscilátor, energie vibračních hladin, typy normálních vibrací). Přechody mezi vibračními energetickými hladinami (NIR spektroskopie v kvalitativní a kvantitativní analýze). Spektra vibrační, rotační a rotační (tuhý a elastický rotor, rotační distorsní konstanta). 8. Přechod světla látkami. Lom světla (Snellův zákon, měření indexu lomu, závislost na vlnové délce, hustotě). Vliv elektrického pole (Kerrův efekt, Kerrův faktor a konstanta a jejich využití ve strukturní analýze). 9. Optická aktivita (specifická otáčivost, závislost na vlnové délce, Drudeova rovnice, Cottonův efekt, optická rotační disperse, cirkulární dichroismus). Optická otáčivost a struktura (absolutní hodnota, oktantové pravidlo). 10. Molekuly v magnetickém poli. (Magnetická indukce, magnetizace, anisotropie magnetické susceptibility. Dielektrika, paramagnetika, ferromagnetika (Curieův zákon, Weissova korekce, Curieova teplota). 11. Elektronová paramagnetická rezonanční spektroskopie. Elektron v magnetickém poli, podmínka resonance, Landého g-faktor, Hyperjemné štěpení - multiplicita signálů. 12. Nukleární magnetická rezonanční spektroskopie. Chování jader v magnetickém poli, jaderný spin, kvantová čísla, podmínka resonance, stínící konstanta (substituční, sterická a solvatační složka). Spin-spinová interakční konstanta, postupná redukce multiplétů, počet NMR signál a symetrie molekuly, intenzita signál a využití v kvantitativní analýze.

Výukové metody: Teoretická příprava v oblasti spektroskopických metod pro identifikaci chemické struktury spojená s výpočtovým seminářem s praktickými výstupy.

Metody hodnocení: Ústní zkouška, předpokladem je zápočet ze semináře.

Literatura:

- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info

C5030 Chemická struktura - seminář

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Brož Ph.D.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Praktické výpočty k jednotlivým tematům přednášky Chemická struktura (C5020). Studenti využití získaných informací ze spektroskopických metod (hmotnostní spektrometrie, difrakční analýza, IČ spektroskopie, NMR atd.) k identifikaci chemické struktury a budou schopni navrhnout vhodný postup ke studiu chemických látek a interpretovat získané údaje.

Osnova:

- 1. Difrakce elektronů a rtg. záření . Elektrony jako částice i záření, kvantová čísla, difrakce na souboru rovin (Huygensova a Ewaldova konstrukce), přímá a reciproká mřížka, interference (Laueho a Braggova metoda), radiální distribuční funkce (Wierlova rovnice). 2. Absorpce elektronů a gama záření. Hmotnostní spektrometrie (metody ionizace, rozlišení a detekce, skupina molekulového píku, hlavní typy fragmentace). Moessbauerova spektroskopie (isotopový posun, kvadrupolové štěpení). 3. Fotoelektronová spektroskopie. Absorpce rtg. fotonu (XPS, ESCA), elektronu (Auger) a UV kvanta (UPS). Rtg. fluorescence. 4. Absorpce UV a vis. záření. Elektronová spektroskopie, (Franckův-Condonův princip, vibrační a rotační struktura energetických diagramů) termická relaxace, fluorescence, fosforescence (typy elektronových přechodů, částice v jednorozměrné potenciálové jámě, chromofory, auxochromy, posuny absorpcí vnějšími a vnitřními vlivy). Využití elektronové spektroskopie ve strukturní a kvantitativní analýze (Lambertův-Beerův zákon). 5. Molekuly v elektrickém poli (polarizovatelnost, indukovaný a permanentní dipolový moment, permitivita dielektrika). Polarizace indukovaná a orientační, Clausius-Mossottiho a Debyeova rovnice. Měření dipolových momentů (Halverstadt-Kumlerova metoda, Gugenheim-Smithova metoda). Index lomu a molární refrakce. 6. Molekuly v elektrickém poli světelné vlny. Rayleighův a Ramanův rozptyl, Ramanova spektroskopie (anisotropie polarizovatelnosti, depolarizace, Stokesovy a antistokesovy přechody, Ramanova spektra vibrační a rotační). 7. Absorpce IR a MW záření. IR spektra vibrační (harmonický a anharmonický oscilátor, energie vibračních hladin, typy normálních vibrací). Přechody mezi vibračními energetickými hladinami (NIR spektroskopie v kvalitativní a kvantitativní analýze). Spektra vibrační, rotační a rotační (tuhý a elastický rotor, rotační distorsní konstanta). 8. Přechod světla látkami. Lom světla (Snellův zákon, měření indexu lomu, závislost na vlnové délce, hustotě). Vliv elektrického pole (Kerrův efekt, Kerrův faktor a konstanta a jejich využití ve strukturní analýze). 9. Optická aktivita (specifická otáčivost, závislost na vlnové délce, Drudeova rovnice, Cottonův efekt, optická rotační disperse, cirkulární dichroismus). Optická otáčivost a struktura (absolutní hodnota, oktantové pravidlo). 10. Molekuly v magnetickém poli. (Magnetická indukce, magnetizace, anisotropie

magnetické susceptibilitu. Dielektrika, paramagnetika, ferromagnetika (Curieův zákon, Weissova korekce, Curieova teplota). 11. Elektronová paramagnetická rezonanční spektroskopie. Elektron v magnetickém poli, podmínka resonance, Landého g-faktor, Hyperjemné štěpení - multiplicita signálů. 12. Nukleární magnetická rezonanční spektroskopie. Chování jader v magnetickém poli, jaderný spin, kvantová čísla, podmínka resonance, stínící konstanta (substituční, sterická a solvatační složka). Spin-spinová interakční konstanta, postupná redukce multipletů, počet NMR signál a symetrie molekuly, intenzita signál a využití v kvantitativní analýze.

Výukové metody: Výpočtový seminář v oblasti spektroskopických metod pro identifikaci chemické struktury s praktickými výstupy.

Metody hodnocení: Účast na semináři je povinná pro získání zápočtu. Kromě toho je třeba správně vyřešit alespoň 50% příkladů ze závěrečného písemného testu.

Literatura:

- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info

C5040 Jaderná chemie

Vyučující: [prof. RNDr. Jiří Příhoda CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (přif plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Kurs seznamuje studenty se základy jaderné chemie a některých aplikačních oblastí. Cílem předmětu je získání znalostí o atomovém jádře, vlastnostech izotopů (izotopové efekty), typech radioaktivních přeměn, kinetice radioaktivních přeměn, ionizujícím záření (vlastnosti, měření, chemické a biologické účinky), jaderných reakcích, metodě radioaktivních indikátorů, jaderné štěpné reakci a základech jaderné energetiky. Součástí přednášky je exkurze do jaderné elektrárny Dukovany.

Osnova:

- 1. Atomové jádro Subatomární částice: typy interakcí, mechanismus interakce, silové pole, virtuální částice jako kvanta pole. Klasifikace částic. Fundamentální částice. Vlastnosti leptonů a antileptonů, leptonové číslo, zákon zachování. Hadrony a antihadrony, kvarky, klasifikace hadronů. Soudržnost kvarků v hadronech. Baryonové číslo, zákon zachování. Soudržnost atomového jádra, výklad pomocí virtuálních gluonů a pionů, jaderné síly. Potenciálová jáma a bariéra, výška bariéry, tunelový efekt. Energetické stavy v potenciálové jámě: hladinový model jádra, kvantové číslo j , schéma energetických hladin, počet nukleonů na hladinách, slupky, nukleonové konfigurace jader. Magická čísla a jádra, výskyt stabilních nuklidů a izotopů. Spin jádra. Vazebná energie a střední vazebná energie jádra. Kapkový model jádra, výpočet vazebné energie a hmotnosti jádra, hladinová stabilizace kapkového modelu. Excitace a deexcitace jádra. Tvar jádra, rotační excitace. 2. Vlastnosti izotopů Prvky v přírodě, jaderné, chemické a fyzikálně-chemické vlastnosti izotopů, význam izotopových efektů, separační faktor. Izotopové efekty v hustotě, při pohybu iontů v magnetickém poli. Plynová centrifuga, izotopový efekt v difúzi plynů a ve skupenských přeměnách. Reakce izotopové výměny, výroba těžké vody, separace $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ procesem NITROX. Izotopové efekty v reakční rychlosti. 3. Radioaktivní přeměny Hmotnostní podmínka, přeměnová energie, zákony zachování, stav jádra po přeměně. Oblast existence stabilních a radioaktivních nuklidů. Přeměny beta: výklad pomocí hladinového modelu jádra, hmotnostní parabola, přeměna nukleonů a slabá interakce. Přeměna β^+ , β^- , elektronový záchyt (a následné děje): změna kvarkového složení nukleonu, posunové zákony, hmotnostní podmínky, přeměnová energie, spektrum emitovaných částic, výběrová pravidla pro změnu spinu a parity. Přeměna α : výskyt, přeměnová energie, spektrum emitovaných částic, výklad pomocí tunelového efektu. Procesy spojené s deexcitací jádra: emise fotonů (přechody elektrické a magnetické, výběrové pravidlo, okamžitá a zpožděná emise, jaderné izomery), vnitřní konverze, emise nukleonů. Samovolné štěpení: tunelový efekt, souvislost s kapkovým modelem jádra, aktivační energie, parametr štěpení. Větvené přeměny. Odrazová energie (odvození) a chemické následky radioaktivních přeměn, vliv změny atomového čísla. 4. Kinetika radioaktivních přeměn Základní zákon radioaktivních přeměn, přeměnová konstanta, rychlost přeměny, aktivita, měrná aktivita, jednotky. Časová změna aktivity, poločas přeměny, jeho určování z časové změny aktivity, poločas u větvené přeměny. Statistický charakter radioaktivní přeměny. Hmotnost radioaktivního nuklidu, určování velmi dlouhých poločasů. Chemické chování stopových koncentrací radioaktivních nuklidů. Určování krátkých dob života excitovaných hladin. Kinetika hromadění radioaktivního produktu radioaktivní přeměny (odvození). Trvalá radioaktivní rovnováha, přehled radioaktivních řad, riziko radonu. Přechodná radioaktivní rovnováha. Generátor krátkodobého radioaktivního nuklidu. Přirozená radioaktivita a radioaktivní prvky. 5. Ionizující záření Základní pojmy: ionizace, excitace, absorpce a dosah záření, sdělování energie, změny

energie a toku záření při průchodu látkou. Dávka záření, dávkový příkon, expozice, expoziční příkon, lineární přenos energie. Mechanismus absorpce záření alfa (jaderné brzdění, interakce s orbitálními elektrony, Braggova křivka), beta (interakce s orbitálními elektrony, brzdné a Čerenkovovo záření), gama (Comptonův rozptyl, fotoefekt, tvorba párů). Absorpční křivky pro jednotlivé druhy záření, dosah ve vzduchu a jiných materiálech, princip ochrany před zářením, polovrstva. Absorpce neutronového záření (zpomalování, jaderná reakce). Zdroje záření. Měření a detekce ionizujícího záření. Základní schéma aparatury., princip měření aktivity (četnosti) dávky a odvozených veličin, spektrometrie). Plynové ionizační detektory: typy, princip funkce, plynové zesílení, provedení detektorů, jejich použití, mrtvá doba detektoru. Scintilační detektory: princip funkce, fotonásobič, typy detektorů a jejich použití. Čerenkovův detektor. Polovodičové detektory: princip funkce, používané materiály, typy detektorů, jejich konstrukce a použití. Princip spektrometrie jaderného záření: funkce analyzátoru výšky impulzů, měřicí kanál, rozlišovací schopnost detektoru, srovnání teoretického a reálného spektra gama záření. Měření neutronů. Metodika měření: souvislost aktivity a četnosti, metody měření aktivity (koincidence, zhášení v kapalně scintilaci), metody snižování pozadí. Termoluminiscenční dozimetrie, fotografická detekce ionizujícího záření, stopové detektory. Využití absorpce ionizujícího záření: aplikace v chemickém průmyslu (měření tloušťky materiálu, radiografie, eliminace statické elektřiny), analýza pomocí absorpce záření g a neutronů, stanovení vlhkosti z rozptylu neutronů, stanovení specifické hmotnosti z rozptylu gama záření. Analýza metodou PIXE a radioizotopovou rtg analýzou. Chemické účinky ionizujícího záření: excitace, ionizace, osud excitovaných stavů, iontů a elektronů. Vznik a reakce radikálů. Zdroje záření pro radiolýzu. Základní reakce při radiolýze vody a uhlovodíků. Radiolýza vodných roztoků, chemická dozimetrie. Využití ionizujícího záření v technologii polymerů. Vliv ionizujícího záření na lidský organismus. Přímý a nepřímý biologický účinek záření, molekulární podstata poškození. Jakostní faktor, dávkový ekvivalent, radiační váhový faktor, ekvivalentní dávka, tkáňový váhový faktor, efektivní dávka. Deterministické účinky: obecná charakteristika, prahová dávka, faktory ovlivňující účinek ionizujícího záření na člověka, typy poškození organismu. Stochastické účinky: obecná charakteristika, formy poškození organismu, kdy lze poškození očekávat, odhad rizika, lineární bezprahová teorie a její kritika. 6. Jaderné reakce Složené jádro jako mechanismus jaderné reakce při nízkých a středních energiích projektilu, excitační energie a deexcitace složeného jádra. Energetické zabarvení jaderné reakce. Kinetika jaderné reakce, účinný průřez, závislost vzniklé aktivity na době ozařování, nasycená aktivita. Závislost výtěžku jaderné reakce na energii projektilu pro endo- a exoergické reakce, prahová energie, rezonance. Realizace jaderných reakcí: požadavky na terčový materiál, zdroje neutronů, kladných projektilů (cyklotron, lineární urychlovač) a fotonů (betatron), zpracování ozařených terčů, význam volby jaderné reakce pro měrnou aktivitu, radioaktivní nečistoty. Prakticky důležité reakce neutronů: reakce (n,gama) - výroba radioaktivních izotopů a transuranů (kombinace reakce (n, g) a přeměny b-), procesy PUREX a TRAMEX. Reakce (n,2n), (n,p), (n,alfa) a jejich praktický význam. Důležité reakce kladných projektilů: (alfa,n), (d,n), (p,n), (p, xn). Reakce těžších iontů: příprava těžších transuranů, princip identifikace nestálých jader. Reakce fotonů. Aktivační analýza: kvalitativní a kvantitativní, destruktivní a nedestruktivní, využití okamžitých částic. Chemické důsledky jaderných reakcí, reakce horkých atomů. 7. Indikátorová metoda Princip metody, izotopicky modifikované sloučeniny, výroba základních značených sloučenin, princip syntetických a biosyntetických metod, Wilzbachova metoda tritiování, metody využívající izotopové výměny. Příklady použití indikátorové metody: samodifúze, izotopová výměna, metabolický obrat, reakční mechanismy (molekulární přesmyky, biosyntéza, metabolismus), metoda izotopového zředování, rozpustnost, velikost povrchu, rozdělovací rovnováhy, radioaktivní činidla. Metodika indikátorových pokusů, radionuklidová a radiochemická čistota preparátů. Využití stabilních izotopů 8. Jaderná štěpná reakce, základy jaderné energetiky Štěpná reakce: uvolňování energie a neutronů, vlastnosti štěpných produktů. Řetězová štěpná reakce, neutronová bilance, multiplikační faktor k a k(inf), možné kombinace paliva a moderátoru, rychlé a pomalé reaktory, množivý charakter rychlého reaktoru. Základní typy energetických reaktorů, popis reaktoru VVER-440, černobylský reaktor. Schéma jaderné elektrárny, bezpečnost provozu, řízení reaktoru. Exkurze do jaderné elektrárny Dukovany.

Výukové metody: přednáška

Metody hodnocení: Zkouška ústní.

Literatura:

- Majer, Vladimír. Základy jaderné chemie, Praha, 1981.
- Hála, Jiří. *Radioaktivita, ionizující záření, jaderná energie*. První vydání. Nakladatelství Konvoj, spol. s.r.o. : Brno, 1998. 311 s. ISBN 80-85615-56-8. info

C5060 Metody chemického výzkumu

Vyučující: [Mgr. Petr Tábořský Ph.D.](#), [Mgr. Miroslava Bittová Ph.D.](#), [doc. Mgr. Jan Preisler Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (plus ukončení). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Cílem předmětu je seznámit studenty s principem a základními aplikacemi následujících metod. Elektronové mikroskopie. Symetrie molekul. Rentgenová strukturní analýza. Proteinová krystalografie. Ramanova a IR spektroskopie. NIR spektroskopie. Cyklická voltametrie. Optická rotační disperse (ORD) a Církulárně dichroická spektroskopie (CD). Elektronová paramagnetická rezonance. Luminiscence.

Osnova:

- 1. Elektronová mikroskopie. Interakce elektronů s pevnou látkou, vlnové vlastnosti elektronu. Elektronový mikroskop (elektromagnetické čočky, elektronová tryska, vakuová soustava), tvorba obrazu a vznik kontrastu. Difrakce na monokrystalu a na polykrystalu. Příprava vzorků - leptání.
- 2. Difrakce rentgenova záření. Elementární krystalografie: symetrie struktury, prostorové grupy symetrie, difrakce rtg. záření, strukturní faktor. Základy strukturní analýzy: sběr dat, jejich redukce, fázový problém a jeho řešení, zpřesnění strukturního modelu, interpretace struktury.
- 3. Krystalografie proteinů. Makromolekulární krystalizační techniky, metoda sedící a visící kapky, očkování. Difrakční experiment: zdroje rtg. záření, detektory, kryokrystalografie. Metody řešení fázového problému u proteinů, metoda molekulárního přemístění, metody kovových derivátů (SIR, MIR, MIRAS), MAD a selenoproteiny. Mapy elektronové hustoty, Výstavba strukturního modelu a jeho zpřesňování.
- 4. Fluorescenční spektroskopie. Fluorescence a další luminiscenční spektroskopie, doba života, kvantový výtěžek. Intenzita fluorescence, zhášení a samozhášení. Spektra excitační a emisní. Kvazičarová fluorescence a fluorescence v pevné fázi. Spektrometr a postup měření.
- 5. Techniky Ramanovy spektroskopie. Pružný a nepružný rozptyl záření (stokesova, antistokesova oblast a Rayleighova linie); výběrová pravidla – polarizovatelnost a tranzitní integrál, depolarizační faktory Ramanových čar; elektronická, rezonanční a povrchově zesílená Ramanova spektroskopie; nelineární efekty - stimulovaný RA efekt, inverzní RA efekt, hyper-RA efekt, koherentní antistokesova Ramanova spektroskopie; experimentální technika měření Ramanových spekter.
- 6. IR spektroskopické metody. Vznik pásů v IR spektrech, výběrová pravidla – dipólový moment a tranzitní integrál; normální, vyšší harmonické a kombinační vibrační přechody; experimentální technika měření IR spekter, používané materiály a rozpouštědla, příprava vzorků k měření; aplikace v kvalitativní, strukturní a kvantitativní analýze, studium vazebných poměrů (řády a pevnost vazeb).
- 7. Blízkoinfračervená spektroskopie. NIR spektroskopie jako metoda bez úpravy vzorku, nízká citlivost, nízké rozlišení. Matematické metody pro kvantitativní a kvalitativní analýzu. Provozní analytika - přenos signálu skleněnými vlákny, kontrola stejnosti produktu při automatické výrobě.
- 8. Církulárně dichroická spektroskopie. Absorpce záření u monomerů a polymerů; absorpce u nukleových kyselin. Výhody a nevýhody metody. Vibrační církulární dichroismus a lineární dichroismus.
- 9. Moderní elektrochemické metody, jejich charakterizace a aplikace. Elektroodový systém, elektroodová reakce. Voltametrie a coulometrie. Potenciostatický a galvanostatický režim. Trendy a kombinované metody.
- 10. Elektronová paramagnetická rezonance jako metoda studia soustav s nenulovým elektronovým spinem. Podstata metody a charakteristiky EPR signálů. Hyperjemná struktura. Aplikace EPR ve strukturní a analytické chemii.
- 11. Symetrie molekul. Prvky a operace bodové symetrie. Aplikace symetrie v chemii.

Výukové metody: Výuka je organizována po dvouhodinových lekcích přednášených specialisty - fakultními i externími - v daném oboru.

Metody hodnocení: Předmět je ukončen ústní zkouškou (zkoušející: prof. Holík).

Literatura:

- Toužín, Jiří-Příhoda, Jiří. Spektrální a magnetické metody studia anorganických sloučenin. 1.vyd.Praha:Státní pedagogické nakladatelství, 1986

C5120 Počítače v chemii a chemometrie

Vyučující: [RNDr. Marta Farková CSc.](#)

Rozsah: 1/0/0. 1 kr. (plus ukončení). Doporučované ukončení: k. Jiná možná ukončení: zk.

Cíle předmětu: Cílem předmětu je seznámit studenty se způsoby zpracování experimentálních dat.

Osnova:

- 1. Odhady základních metrologických charakteristik výsledků. 2. Testování metrologických vlastností výsledků. 3. Určování matematického modelu a jeho parametrů, regrese. 4. Lineární regrese. 5. Metody

obecné regrese, minimalizace funkcí. 6. Absolutní a relativní chyba. Základní zdroje chyb. Vyjádření chyby v obecném tvaru. 7. Přibližné řešení algebraických a transcendentních rovnic. Numerické řešení systémů lineárních algebraických rovnic. Numerické integrování funkcí. 8. Interpolace funkcí. Numerické derivování. Přibližné řešení diferenciálních rovnic. Metoda Monte Carlo. 9. Plánování pokusů. 10. Faktorová analýza. 11. PLS. 12. Umělé neuronové sítě.

Výukové metody: Typ výuky: přednášky, diskuse v hodině

Metody hodnocení: Typ zkoušky: písemná a ústní zkouška

Literatura:

- Pytela, Oldřich. *Chemometrie pro organické chemiky*. 3. přeprac. vyd. Pardubice : Univerzita Pardubice, 2000. 199 s., 26. ISBN 80-7194-309-6. info

C5140 Počítače v chemii a chemometrie - cvičení

Vyučující: [RNDr. Marta Farková CSc.](#), [doc. RNDr. Přemysl Lubal Ph.D.](#)

Rozsah: 0/2/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Cílem předmětu je seznámit studenty s možnostmi použití počítačů v chemii, zejména při zpracování experimentálních dat.

Osnova:

- 1. Seznámení s programem ISIS Draw. 2. Seznámení s programem Winstat. 3. Odhady základních metrologických charakteristik výsledků s použitím programů MS Excel a Winstat. 4. Testování metrologických vlastností výsledků s použitím programů MS Excel a Winstat. 5. Lineární regrese s použitím programů MS Excel a Winstat. 6. Seznámení s programem Maple a možnostmi jeho využití v chemii. 7. Seznámení s programem STATISTICA a možnostmi jeho využití v chemii. 8. Použití internetu v chemii.

Výukové metody: Typ výuky: řešení praktických úloh na PC

Metody hodnocení: Typ zkoušky: samostatné práce na PC

Literatura:

- Pytela, Oldřich. *Chemometrie pro organické chemiky*. 3. přeprac. vyd. Pardubice : Univerzita Pardubice, 2000. 199 s., 26. ISBN 80-7194-309-6. info

C5241 Analytická chemie organických látek

Vyučující: [RNDr. Marta Farková CSc.](#), [doc. RNDr. Pavel Pazdera CSc.](#), [doc. Mgr. Jan Preisler Ph.D.](#)

Rozsah: 1/0/0. 1 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Cílem předmětu je seznámit studenty s klasickou organickou analýzou = charakteristickými fyzikálními vlastnostmi organických látek, elementární analýzou organických látek, analytickou identifikací a stanovením důležitých funkčních skupin organických látek převážně barevnými reakcemi v roztoku. Dále se studenti naučí interpretovat spektra jednoduchých organických látek získaných instrumentálními metodami: UV-VIS, IČ, NMR, MS.

Osnova:

- 1., 2. Charakteristiky analýzy organických látek. Metodika analýzy, vývoj, trendy, možnosti. Předběžné zkoušky a testy. Stanovení fyzikálních konstant a jejich souvislost se strukturou: teplota tání a varu, refraktivita, optická aktivita, rozdělovací konstanty extrakce, molekulová hmotnost, spektrální konstanty. 3., 4. Elementární analýza. Rozklad vzorku, detekce a stanovení C, H, O, N, Cl, Br, I, S, P, F. Automatické metody elementární analýzy. 5., 6., 7., 8. Klasifikace funkčních skupin: třídy rozpustnosti, skupinové a klasifikační reakce pro uhlovodíky, halogenderiváty, alkoholy, fenoly, ethery, epoxidy, peroxidy, aldehydy, ketony, karboxylové kyseliny a jejich funkční deriváty, aminy, hydraziny, nitrily, isokyanidy, nitro-, nitroso-, azo-, azoxy-, diazosloučeniny, thioly, sulfonové a sulfinové kyseliny, funkční deriváty. 9., 10. Sumarizace získaných informací, předpověď pravděpodobné struktury látky a její potvrzení (nová látka-analogie, reakce funkčních skupin, látka dříve popsána - derivatizace) Derivatizace-výběr vhodných derivátů, metody jejich přípravy v mikroměřítku pro jednotlivé třídy látek. 11., 12., 13., 14. Stanovení organických sloučenin na bázi reakcí jejich funkčních skupin: Acidobazické vlastnosti. Redoxní. Stanovení aktivního vodíku, Stanovení vody vzniklé chemickou reakcí. Plynoměrné metody. Vážkové metody. Coulometrie, polarografie ap. Spektrální metody. Adsorpce. Instrumentální metody organické analýzy, rozdělení.

Výukové metody: Typ výuky: přednášky, diskuse v hodině

Metody hodnocení: Typ zkoušky: písemná a ústní zkouška

Literatura:

- Stránský, Zdeněk. *Analyza organických sloučenin a*. 1. vyd. Olomouc : Univerzita Palackého, 1981. 235 s. info
- Stránský, Zdeněk. *Analyza organických sloučenin b*. 1. vyd. Olomouc : Univerzita Palackého, 1981. 235 s. info
- Kalous, Vítěz. *Jak moderní chemie zkoumá strukturu molekul*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1983. 150 s. info
- Holzbecher, Závist. *Analytická chemie [Holzbecher, 1974]*. 2. přeprac. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1974. 506 s. info
- Stučka, Václav. *Instrumentální metody chemické analýzy. I, Elektronová spektroskopie organických molekul*. 1. vyd. Olomouc : Univerzita Palackého, 1974. 111 s. info
- Stučka, Václav. *Instrumentální metody chemické analýzy. II, Hmotová spektroskopie organických molekul*. 1. vyd. Olomouc : Univerzita Palackého, 1975. 128 s. info
- Stučka, Václav. *Instrumentální metody chemické analýzy. IV, Vibrační spektroskopie organ. molekul*. 1. vyd. Olomouc : Univerzita Palackého, 1976. 146 s. info

C5320 Fyzikálně chemické základy NMR

Vyučující: [prof. RNDr. Vladimír Sklenář DrSc.](#), [doc. RNDr. Radovan Fiala CSc.](#)

Rozsah: 2/1/0. 3 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Úvod do spektroskopie nukleární magnetické rezonance. Popis základních principů s využitím klasického vektorového modelu s navazující rigorózní analýzou využívající kvantové mechaniky. Teorie matic hustoty a součinný operátorový formalismus jsou použity pro základní popis experimentů NMR ve více dimenzích. Získané vědomosti umožňují základní orientaci v moderních metodách NMR spektroskopie využívaných v organické a anorganické chemii, biochemii a metodách moderní strukturní biologie a biofyziky.

Osnova:

- 1. Úvod: Historie NMR spektroskopie a současné trendy - využití NMR to ke studiu molekulární struktury v kapalně a pevné fázi, NMR tomografie a NMR zobrazování, pohledy do budoucna, prohlídka NMR laboratoře PřF MU. 2. Základní principy: magnetický dipól, rezonanční podmínka, NMR spektrometr, Fourierova spektroskopie, klasický popis - Blochovy rovnice, relaxační procesy - spin-mřížková a spin-spinová relaxace, Fourierova transformace, citlivost měření. 3. Dynamika spinových systémů: základní vlastnosti nukleárního spinového systému, teorie matic hustoty, maticové reprezentace, operátory, spinový Hamiltonián v Hilbertově reprezentaci, teorie průměrného Hamiltoniánu. 4. Součinný operátorový formalismus: základní principy, názvosloví, vývoj součinných operátorů, Hamiltonián v součinné bázi, složené rotace, pozorovatelné veličiny. 5. 1D Fourierova spektroskopie: excitační sekvence, principy spinového echa, měření relaxačních časů, přenos polarizace, metody INEPT a DEPT, složené pulzy, homo- a hetero-nukleární decoupling, pulzní gradienty. 6. 2D Fourierova spektroskopie: základní principy a formální teorie detekce NMR ve dvou frekvenčních dimenzích, koherenční stezky. 7. Základní metody 2D spektroskopie: korelace chemických posunů - COSY, J-rozlišená spektroskopie, měření spin-spinových skalárních interakcí, korelace dipól-dipólových interakcí - NOESY spektroskopie, fázové cykly, varianty pro měření homo- a hetero-nukleárních spinových systémů, editace spekter. 8. Aplikace NMR ve strukturní analýze biomolekul: proteiny a peptidy, nukleové kyseliny, získávání strukturních parametrů: měření vzdáleností vodíkových atomů, určování dihedrálních úhlů, matematická rekonstrukce prostorové struktury makromolekul.

Výukové metody: Přednášky a cvičení

Metody hodnocení: Ústní zkouška

Literatura:

- *Understanding NMR spectroscopy*. Edited by James Keeler. Chichester : Wiley, 2005. xv, 459 p. ISBN 9780470017876. info
- *Protein NMR spectroscopy principles and practice*. San Diego : Academic Press, 1996. 587 s. ISBN 0-12-164490-1. info
- *NMR and the periodic table*. Edited by Robin Kingsley Harris - Brian E. Mann. London : Academic Press, 1978. 459 s. ISBN 0-12-327650-0. info

- Cavanagh, John - Fairbrother, Wayne J. *Protein NMR Spectroscopy. Principles and Practice*. San Diego : Academic Press, 1996. 587 s. ISBN 0-12-164490-1. info
- *Two-dimensional NMR spectroscopy : applications for chemists and biochemists*. Edited by William R. Croasmun - Robert M. K. Carlson. 2nd ed. New York : VCH Publishers, 1994. xxii, 958. ISBN 1-56081-664-3. info
- Sanders, Jeremy K. M. *Modern NMR spectroscopy : a workbook of chemical problems*. 2nd ed. Oxford : Oxford University Press, 1993. 127 s. ISBN 0-19-855812-0. info
- Evans, Jeremy N. S. *Biomolecular NMR spectroscopy*. Oxford : Oxford University Press, 1995. xvi, 444 s. ISBN 0-19-854766-8. info
- Hoch, Jeffrey C. - Stern, Alan S. *NMR data processing*. New York : Wiley-Liss, 1996. xi, 196 s. ISBN 0-471-03900-4. info
- Hore, Peter J. - Jones, Jonathan A. - Wimperis, Stephen. *NMR : the toolkit*. 1st pub. Oxford : Oxford University Press, 2000. 85 s. ISBN 0-19-850415-2. info
- Rahman, Atta-ur-. *One and Two Dimensional NMR Spectroscopy*. 1. vyd. Amsterdam : Elsevier Science Publishers B.V., 1989. 578 s. ISBN 0-444-87316-3. info
- Ven, Frank J. M. van de. *Multidimensional NMR in Liquids : basic principles and experimental methods*. New York : VCH Publishers, 1995. 399 s. ISBN 1-56081-665-1. info

C5380 Speciální laboratorní technika

Vyučující: [RNDr. Miloš Černík CSc.](#)

Rozsah: 1/0/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Přednáška se zabývá speciálními pracovními technikami užívanými pro syntézu a charakterizaci sloučenin citlivých vůči vodě a kyslíku, jakož i pro studium látek termicky nestabilních a korozivních. Pozornost je věnována především technice vakuové linky, Schlenkových nádobek a rukavicového suchého boxu. Stručněji jsou pojednány metody preparativní kryochemie, sonochemie, syntézy za vysokých tlaků a teplot, základy preparativní fotochemie a reakce v elektrických výbojích. Po ukončení přednášky by studenti měli rozumět principům různých laboratorních technik práce v inertní atmosféře a mít základní znalosti o jejich technických základech. Měli by být schopni vybrat vhodnou techniku nebo pracovní postup pro manipulaci zvolené, vůči kyslíku či vodě citlivé sloučenině, a rozhodnout, jak správně a bezpečně pracovat s látkami s rozdílnými vlastnostmi, např. reaktivními plyny, sloučeninami citlivými vůči vzdušné vlhkosti nebo těkavými a samozápalnými reaktanty.

Osnova:

- 1. Manipulace sloučenin citlivých vůči vlhkosti a kyslíku. Inertní plyny a jejich čištění. Detekce vody a kyslíku v inertních plynech. 2. Rukavicový box s inertní atmosférou. Konstrukce jednoduchého suchého boxu. Dosažení a udržování inertní atmosféry v boxu. Práce v rukavicovém suchém boxu. Polyethylenový rukavicový pytel. 3. Základní komponenty laboratorního skla pro práci v inertní atmosféře. Skleněné zábrusy a broušené kohouty. Vakuové tuky a jejich fyzikální a chemické vlastnosti. Nemazané spoje a sklo-teflonové ventily. Elastoméry pro výrobu o-kroužků a jejich chemická odolnost. 4. Vakuum v chemické laboratoři. Rotační olejové vývěvy a diafragmové vývěvy. Difuzní vývěva a její zapojení do vakuového systému. Teorie čerpání a vytváření vakua. Vakuometry. Detekce a lokalizace netěsností vakuových aparatur. 5. Techniky práce v inertní atmosféře. Rozvod vakua a inertních plynů. Principy techniky Schlenkových nádobek. Laboratorní sklo Schlenkova typu. Technika injekční stříkačky a kanyly. 6. Aparatury konstruované z laboratorního skla Schlenkova typu. Základní operace v ochranné inertní atmosféře: odměřování látek, transfer-rozpouštědel, magnetické a mechanické míchání, filtrace, destilace, sublimace, Soxhletova extrakce. 7. Základní schema a funkce vakuové linky. Čerpací stanice a hlavní rozvod vakua. Pracovní stanice. Přístroje pro měření tlaku plynů. 8. Operace na vakuové lince. Manipulace kondenzovatelných plynů a těkavých kapalin. Transfer a kvantitativní měření množství nekondenzovatelných plynů. Separace těkavých sloučenin. Stanovení tenze par, teploty tání a molekulové hmotnosti. 9. Manipulace korozivních fluoridů a jiných vysoce reaktivních sloučenin. Chemická odolnost konstrukčních materiálů. Kovové a plastové ventily a fitinky. Vakuové systémy pro manipulaci těkavých fluoridů. Příprava vzorků korozivních sloučenin pro měření IR, Ramanových a NMR spekter. 10. Rozpouštědla a reagenty. Čištění a sušení rozpouštědel. Bezpečné zacházení s plyny v tlakových lahvích. Příprava a čištění reakčních plynů. Zkapalněné plyny jako rozpouštědla. 11. Spektroskopie matricově izolovaných látek - technika pro studium reaktivních sloučenin. Materiály matric a jejich vlastnosti. Příprava matric s nestabilními částicemi. Spektra specií izolovaných v matrici. 12. Základy preparativní kryochemie. Klasifikace plynných částic vhodných pro kryochemické experimenty. Konstrukce kryochemických reaktorů. Kryochemické syntézy s parami kovů. Kryochemie molekul generovaných při vysokých teplotách. 13. Speciální zařízení a operace v anorganické syntéze. Reakce za vysokých tlaků. Sonochemie. Syntézy v elektrických výbojích.

Fotochemické reakce s UV zářením. Selektivní stimulace chemických reakcí zářením infračerveného laseru.

Výukové metody: Výuka formou přednášky

Metody hodnocení: Ústní zkouška

Literatura:

- Errington R. J.: Advanced Practical Inorganic and Metalorganic Chemistry, Blackie Academic and Professional, London 1997.
- Shriver D.F., Drezzon M. A.: The manipulation of air-sensitive compounds, 2nd Edn., Wiley, New York 1986..
- Wayda A. L., Darensbourg M.Y., Eds.: Experimental Organometallic Chemistry, ACS Symposium Series 357, American Chemical Society, Washington, DC 1987
- Plesch P. H.: High vacuum techniques for chemical syntheses and measurements, Cambridge Univ. Press, New York 1989, ISBN 0-521-25756-5.
- Jolly W.L., The synthesis and characterization of inorganic compounds, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J. 1970
- Moskovits M., Ozin G.A., Eds., Cryochemistry, John Wiley and Sons. Inc., New York 1976.

C5440 Separáčnı metody

Vyučující: [doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.](#)

Rozsah: 1/0/0. 1 kr. (přif plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cıle předmětu: Během kurzu student získá základnı informace o hlavních separáčnıch metodách použiváných v organické chemii (krystalizace, destilace, sublimace, extrakce a p.) s důrazem na chromatografické metody a aspekty jejich praktického použitı. Budou zmıněny také procesy separace s využitım membrán a elektromigrační metody.

Osnova:

- 1. Chromatografické metody. Úvod, základnı teorie a pojmy. Klasifikace chromatografických systémů a postupů. Základnı teoretické modely popisující chromatografii. Retenční rovnice, teoretické patro, faktory ovlivňující separáčnı účinnost, elučnı poměr a rozlisenı.
- 2. Plynová chromatografie. Základnı pojmy. Van Deemterova rovnice. Technika GC. Blokové schema plynového chromatografu. Nosnı plyn, techniky dávkování vzorku, náplňové a kapilární chromatografické kolony, stacionární fáze, enantioselektivnı kolony.
- 3. Plynová chromatografie. Hlavnı metody detekce použivané v GC. Plamenově ionizační detektor (FID), tepelně vodivostnı detekce (TCD), elektronový záchyt (ECD), spojení GC s hmotnostnı spektrometrem (GC-MS).
- 4. Plynová chromatografie. Kvalitativnı analýza, identifikace z elučnıch údajů, elučnı závislosti (Kovatsovy indexy), selektivnı detektory. Kvantitativnı analýza, faktory ovlivňující přesnost kvantitativnı analýzy, metody kalibrace.
- 5. Kapalinová chromatografie. Základnı pojmy. Chromatografie na sloupci, flash chromatografie - základy techniky, příprava kolon, detekce, stacionární fáze. Planární chromatografie. Papirová chromatografie, tenkovrstvá chromatografie.
- 6. Vysokoučinná kapalinová chromatografie (HPLC). Blokové schema HPLC. Mobilnı fáze, čerpadla, odplynění, gradient mobilnı fáze. Dávkování vzorku. Kolony pro HPLC, stacionární fáze, výběr kolony, enantioselektivnı fáze. Detektory pro HPLC, UV-VIS a fluorescenční detektor, refraktometr, ELSD, polarimetrická detekce.
- 7. Iontová, gelová a afinitnı chromatografie. Klasifikace ionexů a jejich vlastnosti - selektivita ionexů. Rovnováhy při výměně iontů. Chelatační sorbenty. Vylučovací kapalinová chromatografie (GPC, SEC), retence v SEC, stacionární fáze - anorganické a organické gely. Biospecifická afinitnı chromatografie - retence, bioafinitnı sorbenty a podmínky chromatografie.
- 8. Příprava vzorku pro chromatografickou analýzu. Problém získání reprezentativnıho vzorku. Isolační a koncentrační techniky. Derivatizační metody v GC a HPLC.
- 9. Extrakční metody. Rovnováhy mezi dvěma kapalnımi fázemi. Extrakce a roztřepávání. Superkritická extrakce. Voolba a vlastnosti superkritických mobilních fází. Příklady aplikací.
- 10. Destilace. Obecné principy. Prostá desilace. Rektifikace, pojem teoretického patra, faktory ovlivňující separáčnı účinnost kolon, typy destilačních kolon. Destilace za sníženého tlaku, molekulová destilace, destilace s vodnı parou, azeotropnı destilace, extrakční destilace.

- 11. Krystalizace. Vymezení pojmu. Krystalizace z roztoku, vznik krystalizačních center a růst krystalu. Krystalizace z taveniny, zónové tavení. Krystalizační metody dělení enantiomerů, racemická sloučenina, racemát. Přímá krystalizace a dělení přes diastereomerní sloučeniny.
- 12. Membránové separační procesy. Membránové procesy v gradientu chemického potenciálu, dialýza, osmóza. Procesy v gradientu elektrického potenciálu, elektrodialýza, elektroosmóza. Procesy v gradientu tlaku, reversní osmóza, ultrafiltrace.
- 13. Elektroforetické metody. Základní pojmy, pohyblivost iontů, transportní děje. Doprovodné děje při elektroforetické separaci. Volná elektroforéza, Kapilární zónová elektroforéza, izotachoforéza.
- 14. Další separační metody. Sublimace. Vymezení pojmu. Různé techniky sublimace, gradientová sublimace, mrazová sublimace - lyofilizace. Sedimentační metody. Základní pojmy, sedimentační analýza.

Výukové metody: Přednášky

Metody hodnocení: Ústní zkouška, popřípadě kolokvium.

Literatura:

- Soják, Ladislav. *Separace metody v organické chemii a.* 1. vyd. Bratislava : Univerzita Komenského, 1985. 240 s. info
- Churáček, Jaroslav. *Analytická separace látek.* 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1990. 384 s. ISBN 80-03-00569-8. info
- Poole, Colin F. - Poole, Salwa K. *Chromatography today.* Amsterdam : Elsevier, 1991. 1026 s. ISBN 0-444-89161-7. info
- Kolektiv., *Moderní separační metody,* ČSAV Praha 1988.

C5500 Stereochemistry of Organic Compounds

Vyučující: [doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Main objectives can be summarized as follows: to discuss basic principles of organic stereochemistry with preference to to a symmetry-based approach to structures, ligands, faces and reaction classification; to understand chirality as a condition sine qua non for enantiomerism and enantiodifferentiation; to discuss the time-dimension in connection with intramolecular dynamism and time-scale of instrumental methods; to point out problems of the origin of homochirality in living systems; to learn about topological stereochemistry.

Osnova:

- 1. Struktura. Význam, způsoby popisu struktury, vnitřní souřadnice. Konstituce, konfigurace a konformace. Způsoby určování struktury. 2. Stereoisomerie. Hlavní typy stereoisomerů. Energetické vymezení stereoisomerů. Residuální stereoisomery. Diastereomery a enantiomery. 3. Úvod do symetrie. Prvky symetrie, operátory symetrie a bodové grupy symetrie. Vztah chiralita a symetrie. Vztah symetrie a molekulárních vlastností. Stáčení roviny polarizovaného světla, dipólový moment. 4. Konfigurace. Definice absolutní a relativní konfigurace. Nomenklaturní vyjádření absolutní a relativní konfigurace. Metody určování absolutní a relativní konfigurace. 5. Vlastnosti stereoisomerů. Rozlišení stereoisomerů. Vlastnosti racemátů a jejich enantiomerních složek. Metody určování enantiomerního a diastereomerního složení, časová škála experimentu (chiroptické metody, NMR, chromatografie a pod.). 6. Separace stereoisomerů. Separace enantiomerů krystalizací, chemickými metodami přes diastereomery. Kinetická resoluce. Racemizace. 7. Homotopické a heterotopické ligandy a strany, prostereoisomerie a prochiralita. Enantiotopicita, diastereotopicita. Heterotopicita a NMR, anisochronie a anisogamie. 8. Stereochemie alkenů. Alkeny s nízkými rotačními bariérami, neplanární alkeny. Dvojně vazby C=N a N=N. Určování konfigurace isomerů chemickými a fyzikálními metodami. Metody interkonverze cis- trans isomerů. 9. Konformace nasycených a nenasyčených acyklických sloučenin. Nasycené acyklické molekuly s polárními substituenty - anomerní efekt. Diastereomerní rovnováhy v acyklických systémech. Fyzikální a spektrální vlastnosti diastereomerů a konformerů. Konformace a reaktivita. Winsteinova-Holnesova rovnice a Curtiův-Hammettův princip. 10. Konformace a konfigurace cyklických molekul. Určování konfigurace substituovaných kruhů. Stabilita cyklických molekul. Pnutí kruhu, snadnost cyklizace v závislosti na velikosti kruhu a povaze reakčních center, Baldwinova pravidla. Konformační aspekty chemie monocyklických a polycyklických sloučenin, stereoelektronické efekty. 11. Stereoselektivní syntéza. Základy terminologie, kategorie stereoselektivní syntézy. Strategie řízení stereochemie v diastereoselektivní a enantioselektivní syntéze. Využití chirálních neracemických reagentů a katalyzátorů. 12. Chiroptické vlastnosti. Optická aktivita. Anisotropní refrakce, Optická rotační disperse (ORD). Anisotropní absorpce, Cirkulární dichroismus

(CD). Využití CD a ORD při určování konfigurace a konformace. Polarimetrie, empirická pravidla a korelace. 13. Chiralita molekul bez center chiralit. Nomenklatura. Alleny, spirany, atropoisomerie způsobená zábranou rotace kolem jednoduché vazby. Heliceny. Planární chiralita (Cyklofány, anuleny, metaloceny a d.). Kryptostereoisomerie.

Výukové metody: Přednášky

Metody hodnocení: Zkouška s písemnou a ústní částí.

Literatura:

- Eliel, Ernest L. - Wilen, Samuel H. - Doyle, Michael P. *Basic organic stereochemistry*. New York : Wiley-Interscience, 2001. xiv, 688 s. ISBN 0-471-37499-7. info
- Eliel, Ernest Ludwig - Wilen, Samuel H. - Mander, Lewis N. *Stereochemistry of organic compounds*. New York : John Wiley & Sons, 1993. xv, 1267 s. ISBN 0-471-01670-5. info
- Jonas, Jaroslav - Mazal, Ctibor. *Konспект ze základů organické stereochemie*. 1. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 2002. 87 s. ISBN 80-210-2941-2. info
- Eliel, Ernest L. *Stereochemie uhlikařých sloučenin : Stereochemistry of carbon compounds (Orig.)*. Translated by Miloš Tichý. 1. vyd. Praha : Academia, 1970. 541 s. info

C5510 Stereochemistry of Organic Compounds-seminar

Vyučující: [doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: z. Jiná možná ukončení: zk.

Cíle předmětu: Main objective of the seminar is to discuss and analyze the topics of the lecture Stereochemistry of organic compounds on some illustrative and practical examples following the syllabus of the lecture.

Osnova:

- 1. Struktura. Význam, způsoby popisu struktury, vnitřní souřadnice. Konstituce, konfigurace a konformace. Způsoby určování struktury. 2. Stereoisomerie. Hlavní typy stereoisomerů. Energetické vymezení stereoisomerů. Residuální stereoisomery. Diastereomery a enantiomery. 3. Úvod do symetrie. Prvky symetrie, operátory symetrie a bodové grupy symetrie. Vztah chiralit a symetrie. Vztah symetrie a molekulárních vlastností. Stáčení roviny polarizovaného světla, dipólový moment. 4. Konfigurace. Definice absolutní a relativní konfigurace. Nomenklaturní vyjádření absolutní a relativní konfigurace. Metody určování absolutní a relativní konfigurace. 5. Vlastnosti stereoisomerů. Rozlišení stereoisomerů. Vlastnosti racemátů a jejich enantiomerních složek. Metody určování enantiomerního složení, časová škála experimentu (chiroptické metody, NMR, chromatografie a pod.). 6. Separace stereoisomerů. Separace enantiomerů krystalizací, chemickými metodami přes diastereomery. Kinetická resoluce. Racemizace. 7. Homotopické a heterotopické ligandy a strany, prostereoisomerie a prochiralita. Enantiotopicita, diastereotopicita. Heterotopicita a NMR, anisochronie a anisogamie. 8. Stereochemie alkenů. Alkeny s nízkými rotačními bariérami, neplanární alkeny. Dvojná vazba C=N a N=N. Určování konfigurace isomerů chemickými a fyzikálními metodami. Metody interkonverze cis- trans isomerů. 9. Konformace nasycených a nenasyčených acyklických sloučenin. Nasycené acyklické molekuly s polárními substituenty - anomerní efekt. Diastereomerní rovnováhy v acyklických systémech. Fyzikální a spektrální vlastnosti diastereomerů a konformerů. Konformace a reaktivita. Winsteinova-Holnesova rovnice a Curtiův-Hammettův princip. 10. Konformace a konfigurace cyklických molekul. Určování konfigurace substituovaných kruhů. Stabilita cyklických molekul. Pnutí kruhu, snadnost cyklizace v závislosti na velikosti kruhu a povaze reakčních center, Baldwinova pravidla. Konformační aspekty chemie monocyklických a polycyklických sloučenin, stereoelektronické efekty. 11. Stereoselektivní syntéza. Základy terminologie, kategorie stereoselektivní syntézy. Strategie řízení stereochemie v diastereoselektivní a enantioselektivní syntéze. Využití chirálních neracemických reagentů a katalyzátorů. 12. Chiroptické vlastnosti. Optická aktivita. Anisotropní refrakce, Optická rotační disperse (ORD). Anisotropní absorpce, Cirkulární dichroismus (CD). Využití CD a ORD při určování konfigurace a konformace. Polarimetrie, empirická pravidla a korelace. 13. Chiralita molekul bez center chiralit. Nomenklatura. Alleny, spirany, atropoisomerie způsobená zábranou rotace kolem jednoduché vazby. Heliceny. Planární chiralita (Cyklofány, anuleny, metaloceny a d.). Kryptostereoisomerie.

Výukové metody: Seminář. Diskuse vybraných problémů, procvičující a rozšiřující učivo přednášek.

Metody hodnocení: Seminář se zápočtem.

Literatura:

- Eliel, Ernest L. - Wilen, Samuel H. - Doyle, Michael P. *Basic organic stereochemistry*. New York : Wiley-Interscience, 2001. xiv, 688 s. ISBN 0-471-37499-7. info
- Eliel, Ernest Ludwig - Wilen, Samuel H. - Mander, Lewis N. *Stereochemistry of organic compounds*. New York : John Wiley & Sons, 1993. xv, 1267 s. ISBN 0-471-01670-5. info
- Jonas, Jaroslav - Mazal, Ctibor. *Konспект ze základů organické stereochemie*. 1. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 2002. 87 s. ISBN 80-210-2941-2. info
- Eliel, Ernest L. *Stereochemie uhlikatých sloučenin : Stereochemistry of carbon compounds (Orig.)*. Translated by Miloš Tichý. 1. vyd. Praha : Academia, 1970. 541 s. info

C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Brož Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět technikám NMR jako je pulsní NMR a vysvětlit získané údaje. Bude umět použít informace o chemických posunech, interakčních konstantách, tvarech a intenzitách NMR signálů k charakterizaci studovaných soustav a v oblasti kinetických studií. Na základě nabytých znalostí bude schopen interpretovat NMR signály a odvodit neznámé struktury.

Osnova:

- 1. Correlation of chemical shifts Components of screening constant, dependence of delta on electronegativity, on sigma's. Diamagnetic anisotropy, solvent shift, "edge-to face" and "face-to-face" interaction. Calculation of NMR spectra from increments and from electron densities. 2. Lanthanide shift reagents ¹H NMR spectrum in the presence of a shift reagent. Bound chemical shift and shifting magnitude. Nonlinearity of induced chemical shifts with high concentration of LSR. Map of dipolar field (McConnell-Robertson equation). Increase of anisotropy by addition of LSR. Optical active shift reagents - diastereomeric complexes. Topomerisation and the rotation isomerie. Crystal structure of dipyrityl-LSR. 1:1 and 1:2 complexes - equilibrium constants. Complexation of LSR and salts of Ag, mixed shift reagent. LSR and quaternal salts. 3. Coupling constants Energetic levels for AX systém (J=0, J>0 and J

Výukové metody: Teoretická příprava v oblasti NMR metod pro identifikaci chemické struktury a kinetická studia. Přednáška je doplněna praktickými příklady.

Metody hodnocení: Ústní zkouška buď v angličtině nebo češtině.

Literatura:

- Holík, Miroslav. *Čtyři lekce z NMR spektroskopie*. 1. vyd. Brno : Universita J.E. Purkyně, 1987. 113 s. info
- Schraml, Jan. *Dvourozměrná NMR spektroskopie*. 1. vyd. Praha : Academia, 1987. 130 s. info
- Hájek, Milan. *Kvantitativní FT NMR spektroskopie v chemické praxi*. 1. vyd. Praha : Academia, 1989. 164 s. ISBN 80-200-0096-8. info
- Goljer, Igor - Liptaj, Tibor. *Nové metody FT NMR spektroskopie kvapalín*. 1. vyd. Bratislava : VEDA vydavateľ'stvo Slovenskej akadémie vied, 1986. 181 s. info

C5870 EPR spektroskopie

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Kubáček CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Cílem předmětu je výklad základů vysokorozlišovací EPR spektroskopie a jejích chemických aplikací. Obsahem je: energie magnetického dipólu v magnetickém poli, kvantování momentu hybnosti, populace energetických hladin, spinová relaxace, nasycení, tvar linie; stanovení koncentrace radikálů, instrumentace EPR spektroskopie; hyperjemné štěpení v roztocích, distribuce nepárového elektronu; spinové hustoty a populace, McConnellůva rovnice, Karplusova-Fraenkelova rovnice.

Osnova:

- 1. Historie a oblast použití ESR spektroskopie. Radikály v chemii. 2. Energie magnetických dipólů v magnetickém poli. Kvantování momentu hybnosti. 3. Interakce magnetických dipólů s elektromagnetickým zářením. Význam g-faktoru. 4. Populace energetických hladin. Spinová relaxace. Saturace. Tvar spektrálních čar. 5. Kvantitativní měření v ESR spektroskopii. 6. Společné rysy NMR a ESR spektroskopie. 7. Základy přístrojové techniky ESR spektroskopie, rezonátory, zdroj mikrovln, magnet, modulace, detekční systém. 8. Volba experimentálních podmínek, mikrovlnný výkon, modulační amplituda, koncentrace radikálů, teplota. 9. Hyperjemné interakce, anizotropní a izotropní

složka. 10. Rozdělení nepárového elektronu v molekule radikálu, spinová hustota a spinová populace. 11. Mechanismus pi-pi-spinové polarizace, McLachlanova teorie. 12. Mechanismus pi-sigma-spinové polarizace, Karplus-Fraenkelova rovnice, McConnellůva rovnice, hyperkonjugace. 13. Analýza EPR spekter v kapalně fázi. 14. Běžné typy radikálů.

Výukové metody: Přednáška doplněná podle potřeby **procvičováním** probírané látky.

Metody hodnocení: Přednáška doprovázená příklady. **Zkouška / kolokvium** probíhá formou písemného testu. Při zpracování testu studenti mohou použít učebnice, poznámky a další vlastní pomůcky. Požadavky na úspěšnost testu se liší podle zakončení.

Literatura:

- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info
- Kubáček, Pavel. *EPR spektroskopie*. Hypertext 2002.
- Polák, Rudolf - Zahradník, Rudolf. *Kvantová chemie : základy teorie a aplikace*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1985. 466 s. info

C5880 Základy stereochemie

Vyučující: [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [doc. RNDr. Jirí Toužín CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Přednáška je věnována popisu chemické vazby a základů stereochemie anorganických, koordinačních a organokovových sloučenin. Symetrické vlastnosti molekul, řetězovitých a vrstevnatých polymerů a krystalů jsou popisovány na základě bodových i prostorových grup symetrie. Zahrnuty jsou rovněž konformace cyklických i acyklických molekul, isomerie u sloučenin hlavních podskupin PS i koordinačních sloučenin, chiralita a stereochemicky nerigidní a "fluxní" molekuly. Po ukončení tohoto kurzu by studenti měli být obeznámeni se základními pojmy a modely stereochemie a měli by být schopni: * určit symetrii jednoduchých molekul a koordinačních polymerů * předpovědět geometrii molekuly s využitím modelů VSEPR a LCP * rozpoznat a nakreslit všechny izomery, jež jsou možné pro danou molekulu.

Osnova:

- Symetrické vlastnosti molekul: geometrické transformace, prvky a operace symetrie, ekvivalentní prvky symetrie a ekvivalentní atomy, maticový popis operací symetrie, transformační matice a jejich charaktery. Základní pojmy teorie grup: definice grupy, řád grupy, hierarchie grup, odgrupy a nadgrupy, podobnostní transformace, konjugované prvky, třídy konjugovaných prvků, izomorfie grup. Bodové grupy symetrie: operace symetrie jako prvky bodových grup, součiny operací symetrie, systematika bodových grup symetrie. Maticové reprezentace bodových grup symetrie: redukovatelné, neredukovatelné a plně redukované reprezentace, tabulky charakterů neredukovatelných reprezentací a jejich použití, sestavení a redukce redukovatelných reprezentací, direktní součiny neredukovatelných reprezentací, korelační vztahy. Elektronová struktura volných atomů a iontů: symetrické vlastnosti atomových orbitalů, parametry kovalentní chemické vazby, iontový charakter kovalentní vazby. Valenčně-vazebná (VV) teorie: valenční stavy, hybridizace, hybridizační schemata pro sigma- a pi-vazby, hybridní orbitály jako lineární kombinace atomových orbitalů. Teorie ligandového pole (LP): štěpení degenerovaných energetických hladin chemickým okolím (Oh, Td, D4h), konstrukce diagramů energetických hladin, Jahn-Tellerův efekt, spektrální a magnetické vlastnosti komplexů, iontové poloměry přechodných kovů, termodynamické a kinetické důsledky štěpení d-orbitalů. Teorie molekulových orbitalů (MO): sekulární rovnice, Hückelova aproximace, homocyklické a řetězovité pi-systémy, třicenterní vazby, MO v metalocenech, aplikační možnosti a oblast použití VV, LP a MO teorií. Symetrie řetězovitých a vrstevnatých polymerů: šroubové osy a skluzné roviny, jednorozměrná mřížka, grupa translací, symetrie řetězců a přímkové grupy, faktorové grupy, symetrie dvojrozměrných útvarů, rovinné grupy. Symetrie krystalů: trojrozměrné mřížky a krystalografické soustavy, primitivní buňka, 14 Bravaisových mřížek, 32 krystalografických tříd, trojrozměrné prostorové grupy a jejich podgrupy, ekvivalentní pozice a polohová symetrie, orientačně neuspořádané struktury, hypersymetrie. Izomerie chemických sloučenin: definice izomerie a její význam v chemii, klasifikace jednotlivých typů izomerie, strukturální izomerie a stereoizomerie, izomerie koordinačních sloučenin, izomerizační reakce, stereospecifická substituce, trans-efekt. Optická izomerie: asymetrie a dissymetrie, chiralita, enantiomerie a optická aktivita, racemizace, molekuly s více než jedním centrem chiralit, diastereoizomery, absolutní konfigurace, optická rotační disperze a cirkulární dichroismus. Konformace: rotační izomerie acyklických sloučenin, gauche-efekt, atropoizomerie, konformace cyklických sloučenin. Tvar a geometrie molekul: model VSEPR a konfigurace molekul prvků hlavních podskupin, přednostní obsazování poloh jednotlivými typy ligandů, geometrie molekul s násobnými

vazbami, geometrické důsledky ne vazebných interakcí, stereochemicky nerigidní a fluxní molekuly, struktura molekul ve volném a krystalickém stavu. Stereochemie složitých sloučenin: geometrie molekul koordinačních sloučenin, struktura anorganických polymerů, geometrie polyedrických molekul, struktura boranů, klastery.

Výukové metody: Přednáška

Metody hodnocení: ústní zkouška

Literatura:

- Morris, David G. *Stereochemistry [Morris, 2001]*. Cambridge : The Royal Society of Chemistry, 2001. vii, 170 s. ISBN 0-85404-602-. info
- Gillespie, Ronald J. - Popelier, Paul L. A. *Chemical bonding and molecular geometry : From Lewis to Electron Densities*. Edited by Petr C. Ford. Oxford : Oxford University Press, 2001. 267 s. ISBN 0-19-510496-. info
- Zelewsky, Alexander von. *Stereochemistry of coordination compounds*. Chichester : John Wiley & Sons, 1995. x, 254 s. ISBN 0-471-95057-2. info
- Toužín, Jiří - Černík, Miloš. *Základy stereochemie anorganických sloučenin*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1985. 246 s. info
- Fišer, Jiří. *Úvod do molekulové symetrie : aplikace teorie grup v chemii*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1980. 287 s. info
- Jenšovský, Lubor. *Úvod do stereochemie anorganických sloučenin*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1979. 165 s. info

C5885 Základy stereochemie - seminář

Vyučující: [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [doc. RNDr. Jiří Toužín CSc.](#)

Rozsah: 0/2/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Procvičují se praktické aplikace teorie symetrie a grup při popisu chemické vazby, určování symetrie a konfigurace molekul (včetně nerigidních, koordinačně nenasycených a elektronově deficitních molekul) s využitím modelu VSEPR

Osnova:

- Stejná jako u přednášky Základy stereochemie (C5880)

Výukové metody: Seminární výuka spojená s nácvikem využití teorie symetrie a teorie grup při praktickém řešení stereochemických problémů.

Metody hodnocení: Studenti v rámci semináře referují o důležitých stereochemických tématech a seznamují se se základními pojmy, odpovídajícími konvencemi a definicemi. Ukončení zápočtem.

Literatura:

- Toužín, Jiří - Černík, Miloš. *Základy stereochemie anorganických sloučenin*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1985. 246 s. info
- Fišer, Jiří. *Úvod do molekulové symetrie : aplikace teorie grup v chemii*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1980. 287 s. info
- Jenšovský, Lubor. *Úvod do stereochemie anorganických sloučenin*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1979. 165 s. info

C5900 Hmotnostní spektrometrie

Vyučující: [doc. RNDr. Zdeněk Šimek CSc.](#), [doc. RNDr. Jana Klánová Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (plus ukončení). Ukončení: zk.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: - definovat podstatu hmotnostní spektrometrie a charakterizovat ji v kontextu s ostatními spektrálními analytickými metodami; - pochopit a objasnit principy instrumentace a technické řešení používaných ionizačních technik, hmotnostních analyzátorů a detekčních prvků; - vysvětlit mechanismy fragmentace a disociace iontů používanými ionizačními technikami a fragmentačními postupy; - vyhodnotit a interpretovat hmotnostní spektra běžných organických a anorganických látek získaná nejčastěji používanými ionizačními technikami; - posoudit význam spojení hmotnostní spektrometrie s jinými analytickými technikami především s technikami separačními GC/MS, HPLC/MS, CE/MS, ICP/MS; - využít výhod hmotnostní spektrometrie v kvalitativní a kvantitativní analýze různých typů vzorků;

Osnova:

- I. Historie, principy hmotnostní spektrometrie, základní pojmy.
- II. Instrumentace. Zavedení vzorku, vakuový systém, ionizace vzorku, metody ionizace těkavých a netěkavých látek, měkké a tvrdé ionizační techniky. Analýza iontů, rozlišení, magnetický sektor, elektrostatický analyzátor, HRMS. Průletový analyzátor a přístroje MALDI-TOF. Iontová cyklotronová rezonance. Lineární kvadrupólový analyzátor, iontová past. Tandemová hmotnostní spektrometrie. Količní aktivace. Detekce iontů. Ladění spektrometru.
- III. Fragmentace. Metastabilní ionty. Nuklidové ionty. Základní mechanismy fragmentace.
- IV. Hmotnostní spektra a jejich využití. Kvantitativní hmotnostní analýza.
- V. Kombinované techniky. Spojení se separačními technikami GC/MS, HPLC/MS, CE/MS. Zpracování dat. Technika ICP/MS.

Výukové metody: Výuka je vedena jako přednáška s prezentací v Powerpointu. Studenti obdrží před každou přednáškou kopie jednotlivých obrazů pro vpisování vlastních poznámek a dotazů. Srozumitelnost v obtížných partiích je ověřována interaktivně.

Metody hodnocení: přednášky, ústní zkouška Přítomnost na přednášce není povinná ale doporučena pro snadné plynulé zvládnutí a pochopení látky. Nabyté vědomosti jsou ověřeny ústní zkouškou. Tři vzájemně související oblasti jsou obsahem odborné diskuse u ústní zkoušky

Literatura:

- Barker, J. *Mass Spectrometry*. 2nd Ed. Cichester : J. Wiley, 1999. Analytical Chemistry by Open Learning. ISBN 0 471 96762 9. info
- Boehm, S. - Smrčková, S. *Strukturní analýza organických sloučenin*. Praha : VŠCHT Praha, 1995. ISBN 80-7080-235-9. info
- de Hoffman, E. Tandem Mass Spectrometry: A Primer. *Journal of Mass Spectrometry*, John Wiley & Sons, Ltd., 31s. 129-138. ISSN 1076-5174. 1996. info
- Wong, P. S. H. - Cooks, R. G. Ion Trap Mass Spectrometry. *Current Separations*, West Lafayette, USA : Bioanalytical Systems, Inc., 16, od s. 85. 1997. info
- McLafferty, F.W. - Tureček, F. *Interpretation of Mass Spectra*. 4th ed. Sausalito , CA : University Science Book, 1993. ISBN 0-935702-25-3. info
- Kitson, F. G. - Larsen, B. S. - McEwen, C. N. *Gas Chromatography and Mass Spectrometry, A Practical Guide*. San Diego : Academic Press, 1996. ISBN 0-12-483385-3. info

C5910 Chromatografické metody I.

Vyučující: [doc. RNDr. Zdeněk Šimek CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (plus ukončení). Ukončení: zk.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: - definovat podstatu chromatografických metod a charakterizovat je v kontextu s ostatními separačními analytickými metodami; - pochopit a objasnit principy jednotlivých typů chromatografie, instrumentace a technického řešení chromatografických metod, jednotlivých jejich částí a detekčních prvků; - vysvětlit teoretické aspekty a mechanismy chromatografické separace a postupy výběru chromatografických systémů; - vyhodnotit a interpretovat výsledky chromatografické analýzy; - posoudit význam spojení chromatografických technik vzájemně a s jinými analytickými technikami především spektrálními technikami. - charakterizovat trendy vývoje chromatografických metod - využít výhod chromatografie v kvalitativní a kvantitativní analýze různých typů vzorků;

Osnova:

1. Chromatografická separace, retenční charakteristiky, chromatogram a jeho vyhodnocení, míra separace, účinnost kolony. Rozmytí chromatografické zóny. van Deemterova rovnice a Golayova rovnice. Retenční indexy.
2. Plynová chromatografie.
3. Chromatografie plyn-kapalina. Kolony, kapalná fáze a jejich charakterizace, nosiče.
4. Adsorpční plynová chromatografie. Charakteristické rysy, srovnání s GLC. Adsorbenty, aplikace.
5. Kapilární kolony, plnění, WCOT, PLOT, SCOT. Hodnocení kvality.
6. Mobilní fáze, srovnání vlastností plynů.
7. GC Instrumentace, nástřik vzorku, detekce.
8. Kapalinová chromatografie. Stacionární a mobilní fáze, podmínky separace.
9. Kolona, stacionární fáze, vlastnosti sorbentů.
10. Mobilní fáze, klasifikace solventů, vicesložkové mobilní fáze a optimalizace jejich složení, eluční techniky.
11. Techniky, principy, retenční modely, separační strategie, aplikace.

- 12. Instrumentace, čerpadla, nástřiková zařízení, detektory a principy detekce.
- 13. Trendy v rozvoji chromatografických metod.
- 14. Příklady aplikací chromatografických metod.

Výukové metody: Výuka je vedena jako přednáška s prezentací v Powerpointu. Studenti obdrží před každou přednáškou kopie jednotlivých obrazů pro vpisování vlastních poznámek a dotazů. Srozumitelnost obtížných partií je ověřována interaktivně.

Metody hodnocení: Přítomnost na přednášce není povinná ale doporučena pro snadné plynulé zvládnutí a pochopení látky. Nabyté vědomosti jsou ověřeny ústní zkouškou. Tři vzájemně související oblasti jsou obsahem odborné diskuse u ústní zkoušky

Literatura:

- Poole, Colin F. *The essence of chromatography*. 1st ed. Amsterdam : Elsevier, 2003. ix, 925 s. ISBN 0-444-50199-1. info
- Poole, C. F. - Poole, S. K. *Chromatography Today*. 5th Impression. Amsterdam : Elsevier, 1997. ISBN 0-444-89161-7. info
- Meyer, Veronika R. *Practical High-Performance Liquid Chromatography*. 3. vyd. Chichester : J. Wiley & Sons, 1999. 338 s. ISBN 0-471-98372-1. info
- Lindsay, S. *High Performance Liquid Chromatography*. 2nd Edit. Chichester : J. Wiley, 1992. Analytical Chemistry by Open Learning (Series). ISBN 0 471 93115 2. info
- *Chromatography 6th edition :fundamentals and applications of chromatography and related differential migration methods*. Edited by E. Heftmann. 1st ed. Amsterdam : Elsevier, 2004. xlii, s. 5. ISBN 0-444-51106-7. info

C6010 Toxikologie

Vyučující: [RNDr. Karel Pícka Ph.D.](#)

Rozsah: 1/0/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět a vysvětlit: základní pojmy v toxikologii a chemické bezpečnosti; místní účinky, akutní a chronické systémové účinky, pozdní účinky, nebezpečné fyzikálně chemické vlastnosti a ekotoxikologické vlastnosti látek a přípravků; metody testování a zásady hodnocení vlastností, klasifikace a označování nebezpečných látek a přípravků; faktory ovlivňující účinky látek na lidský organizmus; interakce látek s organizmem – expozice, vstřebávání, distribuce, biotransformace a eliminace xenobiotik, interakce na molekulární, buněčné a orgánové úrovni; právní předpisy České republiky a EU v oblasti látek a přípravků, ochrany veřejného zdraví a bezpečnosti a ochrany zdraví při práci; přípustné limity škodlivin v pracovním ovzduší a v pitné vodě, maximální limity reziduí pesticidů v potravinách; zásady hodnocení rizik a ochrany zdraví při práci s látkami a přípravky, postupy při nehodách spojených s expozicí látkám a přípravkům; nebezpečné vlastnosti významných anorganických a organických látek; zdroje informací o nebezpečných vlastnostech látek a přípravků.

Osnova:

- 1. Úvod, cíle a náplň předmětu.
- Základní pojmy - toxikologie, chemická bezpečnost, chemické škodliviny, xenobiotika, expozice, dávka, účinek, doba latence, odpověď, nebezpečnost, riziko, klasifikace, nebezpečné látky a přípravky, výstražné symboly nebezpečnosti, R- a S-věty.
- Místní účinky látek, testování a hodnocení akutních dráždivých a žíravých účinků látek, látky a přípravky dráždivé a žíravé.
- 2. Celkové (systémové) účinky látek, akutní a chronické otravy, testování akutní, subakutní, subchronické a chronické toxicity, LD50, LC50, NOAEL, LOAEL, hodnocení toxicity, látky a přípravky vysoce toxické, toxické a zdraví škodlivé.
- Senzibilizace, alergie, testování a hodnocení senzibilizujících účinků látek, látky a přípravky senzibilizující.
- 3. Pozdní účinky látek.
- Mutageny, genové, chromozomové a genomové mutace, genetická toxikologie, testy reverzních mutací, chromozomových aberací, poškození a reparace DNA, epidemiologické studie, hodnocení mutagenity, látky a přípravky mutagenní kategorie 1, 2 nebo 3.
- 4. Karcinogenita, mechanismus karcinogeneze, testování karcinogenity, epidemiologické studie, hodnocení karcinogenity, látky a přípravky karcinogenní kategorie 1, 2, nebo 3.

- 5. Reprodukční a vývojová toxicita, embryotoxicita, teratogenita, testování reprodukční toxicity a teratogenity, epidemiologické studie, hodnocení reprodukční toxicity, látky a přípravky toxické pro reprodukci kategorie 1, 2, nebo 3.
- 6. Nebezpečné fyzikálně chemické vlastnosti, testování, látky a přípravky výbušné, oxidující, extrémně hořlavé, vysoce hořlavé a hořlavé.
- 7. Vlastnosti látek nebezpečné pro životní prostředí, ekotoxikologie, testování toxicity a dalších vlastností, hodnocení ekotoxicity a dalších vlastností nebezpečných pro životní prostředí, látky a přípravky nebezpečné pro životní prostředí.
- 8. Faktory ovlivňující účinek látky - látka, organizmus, dávka, další.
- 9. Interakce látek s organismem. Expozice, cesta vstupu, vstřebávání, distribuce, biotransformace (základní reakce 1. a 2. fáze metabolické přeměny xenobiotik), vylučování, interakce na molekulární, buněčné a orgánové úrovni.
- Biologické expoziční testy, limitní hodnoty ukazatelů biologických expozičních testů, biologické monitorování expozice zaměstnanců genotoxickým faktorům.
- 10. Evropská legislativa v oblasti látek a přípravků - směrnice č. 67/548/EHS, nařízení č. 1907/2006 (REACH) a č. 1272/2008 (CLP).
- Česká legislativa v oblasti látek a přípravků, ochrany veřejného zdraví, ochrany zdraví při práci a prevenci závažných havárií způsobených chemickými látkami – zákon č. 356/2003 Sb., o chemických látkách a chemických přípravcích, zákon č. 258/2000 Sb., o ochraně veřejného zdraví a jeho prováděcí předpisy, zákon č. 262/2006 Sb., zákoník práce, zákon č. 309/2006 Sb., o zajištění dalších podmínek bezpečnosti a ochrany zdraví při práci, nařízení vlády č. 361/2007 Sb., kterým se stanoví podmínky ochrany zdraví při práci, zákon č. 59/2006 Sb., o prevenci závažných havárií aj.
- Přípustné expoziční limity a nejvyšší přípustné koncentrace látek a prachů v pracovním ovzduší, limitní koncentrace chemických faktorů a prachu ve vnitřním prostředí staveb, limity pro chemické látky ve vodě a potravinách, maximální limity reziduí v potravinách.
- Testování a registrace pesticidů, principy toxikologického hodnocení reziduí pesticidů a stanovení jejich přípustných limitů v poživatinách.
- 11. Zásady hodnocení rizik a ochrany zdraví při práci s chemickými látkami, vybavení pracoviště, osobní ochranné pracovní prostředky, zásady předlékařské první pomoci při expozici chemickým látkám.
- 12. Speciální toxikologie anorganických látek.
- 13. Speciální toxikologie významných skupin organických látek (alifatické a aromatické uhlovodíky, halogenované uhlovodíky, alkoholy, fenoly, ethery, aldehydy, ketony, karboxylové kyseliny a jejich deriváty, estery anorganických kyselin, nitrosloučeniny, aminy, organokovové sloučeniny).
- 14. Zdroje informací o nebezpečných vlastnostech látek a přípravků. Bezpečnostní listy, toxikologická literatura, databáze na CD-ROM a online, toxikologická informační centra.

Výukové metody: přednášky doprovázené odkazem na odpovídající zákonné podklady

Metody hodnocení: Přednáška Ústní zkouška Požadavky při zkoušce vychází z osnovy předmětu. Studentovi jsou zadány 4 otázky: 1. z témat 1-7 2. z témat 8-11, 14 3. z téma 12 4. z téma 13

Literatura:

- *Základy obecné a speciální toxikologie.* Edited by Karel Picka - Jiří Matoušek. 1. vyd. Ostrava : Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, 1996. 103 s. ISBN 80-85368-91-9. info
- Tichý, Miloň. *Toxikologie pro chemiky. Toxikologie obecná, speciální, analytická a legislativa.* 2. vyd. Praha : Karolinum, 2004. 116 s. ISBN 80-246-0566-X
- Náhradní obsah: Horák, Josef - Linhart, Igor - Klusoň, Petr. *Úvod do toxikologie a ekologie pro chemiky.* 1. vyd. Praha : Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 2004. 187 s. ISBN 80-7080-548-X
- Matrka, Miroslav - Rusek, Vlastimil. *Průmyslová toxikologie : úvod do obecné a speciální toxikologie [Matrka, 1998].* 3. opr. vyd. Pardubice : Vysoká škola chemicko-technologická, 1998. 157 s. ISBN 80-7194-131-. info

C6020 Jaderná chemie - laboratorní cvičení

Vyučující: [Mgr. Jiří Křivohlávek](#)

Rozsah: 0/0/3. 3 kr. Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Na konci kurzu bude student schopen: používat přístroje pro detekci a měření ionizujícího záření; pracovat se zdroji ionizujícího záření; separovat a studovat vlastností vybraných radionuklidů; orientovat se v základních zákonných normách, které se týkají práce se zdroji ionizujícího záření a v principech radiační ochrany.

Osnova:

- 1. Bezpečnost práce a principy radiační ochrany.
- 2. Chyby při měření radioaktivních vzorků.
- 3. Mrtvá doba scintilační sondy.
- 4. Charakteristika scintilační sondy.
- 5. Spektroskopie gama záření s krystalovým detektorem.
- 6. Absorpce záření gama a beta.
- 7. Samoabsorpce záření beta.
- 8. Určení poločasu přeměny krátkodobého radionuklidu.
- 9. Určení poločasu přeměny dlouhodobého radionuklidu.
- 10. Určení stupně obohacení uranových preparátů.
- 11. Radioaktivní rovnováha.
- 12. Stanovení objemové aktivity radonu.
- 13. Spektroskopie záření alfa.
- 14. Měření nízkenergetického záření beta metodou kapalné scintilace.

Výukové metody: Laboratorní cvičení

Metody hodnocení: Výuka formou provádění úloh a měření. Z každé úlohy student zpracuje protokol. Nutná 100 % účast. Hodnocení formou klasifikovaného zápočtu.

Literatura:

- Hála, Jiří. *Cvičení z jaderné chemie*. 3. přeprac. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 1997. 97 s. ISBN 80-210-1636-1. info

C6180 Pokročilá organická chemie - praktikum

Vyučující: [Mgr. Kamil Paruch PhD.](#)

Rozsah: 0/0/5. 5 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Cílem praktika C6180 je seznámit studenty s tradičními i moderními metodami organické syntézy. Každý posluchač provede jemu přiřazenou několikastupňovou syntézu, jejíž součástí bude krátká rešerše klíčových reakcí (např. Diels-Alderova reakce, Suzukiho coupling, ozonolýza, Friedel-Craftsova acylace apod.), které budou v jednotlivých krocích použity. Studenti provedou purifikaci a charakterizaci jimi připravených intermediátů a cílových sloučenin a prakticky se tak seznámí s nejčastěji používanými metodami strukturní analýzy organických látek, zejména na bázi NMR. Na konci tohoto kurzu bude student schopen samostatně provádět vícestupňovou syntézu, purifikaci a strukturní charakterizaci komplexnějších organických sloučenin.

Osnova:

- Helicenbischinony: redukce chinonů, alkylace fenolů, katalýza fázovým přenosem, Friedel-Craftsova acylace, příprava silylenoetherů, Diels-Alderova reakce, oxidace hydrochinonů na chinony. Pyrazolo[1,5-a]pyrimidiny: cyklizační reakce, regioselektivní halogenace heterocyklických sloučenin, nukleofilní substituce, zavedení a odstranění chránících skupin, paladiem katalyzované reakce, separace enantiomerů pomocí HPLC na chirální stacionární fázi. Substituované cyklopentany: regioselektivní adice na elektronově chudé alkyne, příprava cyklopentadienu, Diels-Alderova reakce, dihydroxylace, ozonolýza, redukce pomocí hydridů, použití chránících skupin na bázi silyletherů. Supramolekulární stavební bloky na bázi glykolurilu a [1.1.1]bicyklopentanu: nukleofilní substituce na benzyhalidech, Staudingerova redukce, cyklodimerace, práce s methyllithiem a butyllithiem.

Výukové metody: teoretická příprava, laboratorní cvičení, individuální diskuse s vyučujícím

Metody hodnocení: Hodnocení sestává ze dvou kritérií: 1. celkový výtěžek a čistota finálního produktu a jednotlivých intermediátů. 2. schopnost studenta navrhnout alternativní metodu realizace jednotlivých syntetických kroků.

Literatura:

povinná literatura

- *Organic syntheses*. Edited by Jeremiah P. Freeman. Rev. ed. New York : John Wiley & Sons, 1993. 696 s. ISBN 0-471-58565-3. info

doporučená literatura

- *Comprehensive organic synthesis : selectivity, strategy & efficiency in modern organic chemistry. Volume 8, Reduction.* Edited by Barry M. Trost - Ian Fleming. 1st ed. Oxford : Pergamon Press, 1991. xxv, 1139. ISBN 0-08-040599-18. info
- *Encyclopedia of reagents for organic synthesis.* Edited by Leo A. Paquette. 2nd ed. Chichester : Wiley, 2009. xvi, 10978. ISBN 978-0-470-01754. info
- *Organic reactions.* Edited by S.E Denmark. New York : John Wiley & Sons, 2009. ISBN 9780470423745. info
- *Comprehensive organic synthesis : selectivity, strategy & efficiency in modern organic chemistry. Volume 3, Carbon-carbon [sigma]-bond-formation.* Edited by Barry M. Trost - Ian Fleming - Gerald Pattenden. 1st ed. Oxford : Pergamon Press, 1991. xxi, 1186. ISBN 0-08-040594-43. info
- *Comprehensive organic synthesis : selectivity, strategy & efficiency in modern organic chemistry. Volume 6, Heteroatom manipulation.* Edited by Barry M. Trost - Ian Fleming - Ekkehard Winterfeldt. 1st ed. Oxford : Pergamon Press, 1991. xxi, 1194. ISBN 0-08-040597-56. info
- *Comprehensive organic synthesis : selectivity, strategy & efficiency in modern organic chemistry. Volume 2, Additions to c-x [pi] bonds. Part 2.* Edited by Barry M. Trost - Ian Fleming - Clayton H. Heathcock. 1st ed. Oxford : Pergamon Press, 1991. xxiii, 123. ISBN 0-08-040593-42. info
- *Comprehensive organic synthesis : selectivity, strategy & efficiency in modern organic chemistry. Volume 1, Additions to c-x [pi] bonds. Part 1.* Edited by Barry M. Trost - Ian Fleming - Stuart L. Schreiber. 1st ed. Oxford : Pergamon Press, 1991. xxi, 989 s. ISBN 0-08-040592-41. info
- *Comprehensive organic synthesis : selectivity, strategy & efficiency in modern organic chemistry. Volume 7, Oxidation.* Edited by Barry M. Trost - Ian Fleming - Steven V. Ley. 1st ed. Oxford : Pergamon Press, 1991. xxv, 1012. ISBN 0-08-040598-37. info
- *Comprehensive organic synthesis : selectivity, strategy & efficiency in modern organic chemistry. Volume 4, Additions to and substitutions at c-c [pi] bonds.* Edited by Barry M. Trost - Ian Fleming - Martin F. Semelhack. 1st ed. Oxford : Pergamon Press, 1991. xxi, 1299. ISBN 0-08-040595-44. info
- *Comprehensive organic synthesis : selectivity, strategy & efficiency in modern organic chemistry. Volume 9, Cumulative indexes.* Edited by Barry M. Trost - Ian Fleming. 1st ed. Oxford : Pergamon Press, 1991. xv, 810 s. ISBN 0-08-040600-99. info
- *Comprehensive organic synthesis : selectivity, strategy & efficiency in modern organic chemistry. Volume 5, Combining c-c [pi] bonds.* Edited by Barry M. Trost - Ian Fleming - Leo A. Paquette. 1st ed. Oxford : Pergamon Press, 1991. xxv, 1333. ISBN 0-08-040596-75. info

C6250 Metody chemického výzkumu - praktikum

Vyučující: [RNDr. Marta Farková CSc.](#), [Ing. Blanka Vrbková](#)

Rozsah: 0/0/5. 5 kr. (plus ukončení). Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Cílem předmětu je prakticky seznámit studenty s klasickými postupy analýzy organických sloučenin, které jsou základem instrumentálních postupů, a dále s instrumentálními separačními metodami vhodnými pro analýzu organických sloučenin.

Osnova:

- 1. Orientační zkoušky, kvalitativní elementární analýza, klasifikační a skupinové reakce, stanovení fyzikálních konstant organických látek. 2. Semimikrostanovení uhlíku a vodíku. 3. Volumetrické stanovení dusíku dle Dumase a Dubského. 4. Mikrostanovení síry dle Schönigera. 5. Stanovení dusíku Kjehldalovou metodou. 6. Stanovení dusíku Kjehldalovou metodou s využitím automatického titrátoru a přístroje EcaFlow. 7. Stanovení barviv metodou TLC. 8. Coulometrické stanovení mědi ve víně pomocí automatického laboratorního analyzátoru EcaFlow. 9. HPLC - Analýza směsi methylxantinů. 10. ITP - Stanovení kyseliny glutamové. 11. ITP stanovení aminopolykarboxylových kyselin. 12. Plynová rozdělovací chromatografie - Určení složení rozpouštědel. 13. Stanovení mědi ve víně metodou AAS. 14. UV spektrofotometrie - Stanovení bílkoviny ve vejci. 15. Stanovení obsahu iontů kademnatého, zinečnatého a olovnatého voltametricky s využitím automatického laboratorního analyzátoru EcaFlow 150GLP a programu EcaStat.

Výukové metody: Typ výuky: studenti musí absolvovat všechny úlohy zařazené do cvičení

Metody hodnocení: Typ zkoušky: písemné práce během semestru, závěrečná písemná práce na konci semestru, ústní zkoušení během cvičení. Studenti musí odevzdat protokoly ze všech úloh.

Literatura:

- Stránský, Zdeněk. *Analýza organických sloučenin a.* 1. vyd. Olomouc : Univerzita Palackého, 1981. 235 s. info

- Stránský, Zdeněk. *Analýza organických sloučenin b.* 1. vyd. Olomouc : Univerzita Palackého, 1981. 235 s. info

C6310 Symetrie molekul

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Kubáček CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Základní vlastnosti grupy, multiplikační tabulka a třída. Prvky a operace symetrie. Grupy bodové symetrie, klasifikace molekul. Reprezentace grupy, charaktery. Výběrová pravidla ve spektroskopii a alikace v teorii chemické vazby. Cílem předmětu je seznámit s východisky rozboru chemického problému z pohledu symetrie a tento rozbor procvičit.

Osnova:

- Úvod. Symetrie a přírodní vědy, historický přehled. 1. Grupa, vlastnosti grupy, multiplikační tabulka, podgrupa, třída. 2. Prvky a operace symetrie. 3. Bodové grupy symetrie, klasifikace molekul podle symetrie. 4. Vlastnosti molekul podmíněné symetrií. 5. Maticové reprezentace operací symetrie, charaktery. 6. Neredukovatelné reprezentace, jejich charaktery, degenerace. 7. Tabulky charakterů neredukovatelných reprezentací. 8. Transformační vlastnosti funkcí $x, y, z, xy, xz, yz, x^2, y^2, z^2$ a rotací. 9. Nulové a nenulové hodnoty integrálů. 10. Výběrová pravidla pro spektrální přechody. 11. Symetrie molekulových vibrací. 12. Symetrie a chemická vazba.

Výukové metody: Přednáška doplněná podle potřeby **procvičováním** probírané látky.

Metody hodnocení: **Zkouška / kolokvium** probíhá formou písemného testu. Při zpracování testu studenti mohou použít učebnice, poznámky a další vlastní pomůcky. Požadavky na úspěšnost testu se liší podle zakončení.

Literatura:

- Atkins, P. W. - Paula, Julio de. *Atkins' physical chemistry.* 8th ed. Oxford : Oxford University Press, 2006. xxx, 1064. ISBN 0-19-870072-5. info
- Cotton, Frank Albert. *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd Edition, John Wiley & Sons; ISBN: 0471510947
- Hargittai, István - Hargittai, Magdolna. *Symmetry through the eyes of a chemist.* 2nd ed. New York : Plenum Press, 1995. xii, 496 s. ISBN 0-306-44852-1. info

C6320 Chemická kinetika

Vyučující: [doc. RNDr. Jiří Sopoušek CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Formální kinetika (rychlost reakce, rychlostní konstanta, řád reakce). Určení řádu reakce (metoda počátečních rychlostí, integrační, frakčních časů, izolační). Reakční mechanismus a rychlostní zákony (molekularita, elementární reakce). Následné, souběžné a zpětné reakce (ustálený stav, rychlost určující krok). Katalyzované reakce (homogenní, enzymatické, heterogenní). Řetězové reakce (polymerace, rozvětvený řetězec). Reakční termodynamika (Arrheniova rovnice, kolizní teorie a teorie přechodového stavu). Difúze v tuhé fázi. Elektroodová kinetika.

Osnova:

- 1. Základní pojmy chemické kinetiky: rychlost reakce, rozsah reakce, rychlostní rovnice, řád reakce, elementární reakce, molekularita. Metody k určení řádu reakce 1: počátečních rychlostí, zlomkových časů, poločas reakce, střední doba života. 2. Metody k určení řádu reakce 2: derivační a integrační rychlostní rovnice pro reakce 1. a 2. řádu, nelineární rovnice, metoda izolační. 3. Reakce vratné: dynamická rovnováha, rovnovážná konstanta, reakce unimolekulární a bimolekulární, rychlostní rovnice lineární a exponenciální. 4. Reakce souběžné (paralelní): rozvětvené, konkurenční, nezávislé. Reakce následné, ustálený stav, předrovnováha. 5. Reakce katalyzované 1: homogenní katalýza, acidobazická katalýza, autokatalýza, enzymová katalýza, rovnice Michaelisova-Mentenové, nestacionární kinetika, integrovaná rovnice Michaelisova-Mentenové, složité enzymové reakce (Clelandova symbolika, Kingova-Altmanova metoda), inhibice. 6. Reakce katalyzované 2: heterogenní katalýza, chemisorpce a pokrytí povrchu, adsorpční izotermy (Langmuirova, BET, Freundlichova, Temkinova), uni a bimolekulární reakce na povrchu, inhibice produktem. 7. Reakce řetězové: iniciace, propagace, terminace, reakce radikálové, reakce větvené, polymerace, hoření, exploze. 8. Reakce oscilující: oscilátory (Lotka-Volterra, Brusselátor, Oregonátor), limitní cyklus, rekurentní rovnice. Metody relaxační: teplotní, tlakový skok, ultrazvuk, mikrovlny. 9. Závislost rychlostní konstanty na

teplotě 1: Arrheniova rovnice, srážková teorie, pravděpodobnostní faktor, Lindemannova teorie unimolekulárních reakcí. 10. Závislost rychlostní konstanty na teplotě 2: plochy potenciální energie aktivovaný komplex, Eyringova rovnice, reakční termodynamika. 11. Mechanismy difúze. Látkové toky a difúzní koeficienty. 1 a 2. Fickův zákon. Analytické a numerické řešení difúzních rovnic, okrajové podmínky. Difúze v neideálních soustavách. 12. Elektrodová kinetika Mechanismus přenosu elektronu v homogenním a v heterogenním prostředí (na rozhraní elektroda/roztok), Marcusova teorie, přepětí, Butlerova a Volmerova rovnice, koeficient přenosu náboje, rychlost elektrodové reakce, elektrodový proces s chemickou reakcí (předřazená, vřazená a následná chemická reakce), heterogenní rychlostní konstanta, vyhodnocení heterogenních rychlostních, konstant pomocí běžných elektrochemických metod.

Výukové metody: Přednášky.

Metody hodnocení: Studenti navštěvují přednášku. Je preferována ústní zkouška.

Literatura:

- Treindl, Ľudovít. *Chemická kinetika*. 2. přeprac. vyd. Bratislava : Slovenské pedagogické nakladateľstvo, 1990. 347 s. ISBN 80-08-00365-0. info
- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info

C6330 Chemická kinetika - seminář

Vyučující: [doc. RNDr. Jiří Sopoušek CSc.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Praktické výpočty k jednotlivým tematům přednášky Chemická kinetika (C6320).

Osnova:

- Stejná jako u přednášky Chemická kinetika (C6320).

Výukové metody: Diskuse skupiny. Řešení kinetických problémů.

Metody hodnocení: Studenti řeší s pomocí učitele kinetické příklady a vypracovávají individuální domácí úlohy. Nakonec vykonají závěrečný test. Minimální skóre je 50%.

Literatura:

- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info
- Masel, Richard I. *Chemical kinetics and catalysis*. New York : John Wiley & Sons, 2002. xiii, 952. ISBN 0-471-24197-0. info

C6390 Fyzikální metody organické chemie - praktikum

Vyučující: [RNDr. Slávka Janků Ph.D.](#), [Mgr. Jaromír Literák Ph.D.](#)

Rozsah: 0/0/3. 3 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Cílem kursu je naučit studenty běžně používat metody fyzikální organické chemie pro stanovení struktury nebo čistoty produktů syntézy.

Osnova:

- 1. Infračervená spektroskopie. 2. Ultrafialová spektroskopie. 3. Plynová chromatografie. 4. Vysokotlaká kapalinová chromatografie. 5. Mikrovlnná chemie. 6. Plynová chromatografie s hmotnostní detekcí.

Výukové metody: Laboratorní cvičení.

Metody hodnocení: Po každé úloze dodá student protokol o vykonané práci s výsledky měření dodané neznámé sloučeniny. Tyto protokoly jsou podmínkou zápočtu.

Literatura:

- V. Milata, P. Segla, Vybrané metody molekulovej spektroskopie, (Selected methods of molecular spectroscopy), STU Bratislava, 2007, ISBN 978-80-227-2618-4

C6410 Organická analýza - praktikum

Vyučující: [RNDr. Marta Farková CSc.](#), [doc. RNDr. Pavel Pazdera CSc.](#)

Rozsah: 0/0/3. 3 kr. (plus ukončení). Doporučované ukončení: kz. Jiná možná ukončení: z.

Cíle předmětu: Hlavním cílem je praktické osvojení metod a technik z analýzy a identifikace organických látek.

Osnova:

- Důkaz a stanovení organoelementů po mineralizaci vzorku. Důkaz a identifikace organické látky (směsi). Ověření metodiky na známém individuu, analýza neznámé struktury. Aplikace reakcí funkčních skupin, derivatizace i spektrálních metodik (FTIR, NMR metodiky, MS).

Výukové metody: Typ výuky: studenti musí absolvovat všechny úlohy zařazené do cvičení

Metody hodnocení: Laboratorní cvičení.

Literatura:

- Veibel, Stig. *Analytik organischer Verbindungen*. Berlin : Akademie-Verlag, 1960. 320 s. info
- Večeřa, Miroslav. *Organická elementární analýza*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1967. 178 s. úOrganic elemental analysis.
- Večeřa, Miroslav - Gasparič, Jiří. *Důkaz a identifikace organických látek*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1963. 350 s./Detection and identification of organic compounds

C6740 Elektrické vlastnosti molekul

Vyučující: [doc. RNDr. Libuše Trnková CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (přif plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: 1. Molekula jako systém elektrických nábojů. Vlastnosti molekul podmíněné stálou a proměnnou elektronovou hustotou. 2. Dielektrikum v elektrickém poli. 3. Dipólový moment a struktura molekul. Měření a výpočty dipólových momentů. 4. Dielektrické vlastnosti kapalin, krystalů a koloidních soustav. 5. Mezimolekulární interakce. 6. Dielektrická ztráta, doba relaxace. Kinetická teorie dielektrické relaxace a viskozity. 7. Optické jevy vyvolané interakcí molekul s elektromagnetickým zářením. 8. Adsorpce molekul na fázovém rozhraní, vliv elektrického pole. 9. Komplexy s přenosem protonu nebo iontu. 10. Komplexy s přenosem náboje.

Osnova:

- 1. Molekula jako systém elektrických nábojů. Vlastnosti molekul podmíněné stálou a proměnnou elektronovou hustotou. 2. Dielektrikum v elektrickém poli. 3. Dipólový moment a struktura molekul. Měření a výpočty dipólových momentů. 4. Dielektrické vlastnosti kapalin, krystalů a koloidních soustav. 5. Mezimolekulární interakce. 6. Dielektrická ztráta, doba relaxace. Kinetická teorie dielektrické relaxace a viskozity. 7. Optické jevy vyvolané interakcí molekul s elektromagnetickým zářením. 8. Adsorpce molekul na fázovém rozhraní, vliv elektrického pole. 9. Komplexy s přenosem protonu nebo iontu. 10. Komplexy s přenosem náboje.

Výukové metody: Přednáška s výpočty.

Metody hodnocení: písemný test, ústní zkouška

Literatura:

- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info
- Atkins, Peter William. *The elements of physical chemistry [Atkins, 1992]*. Oxford : Oxford University Press, 1992. 11, 496 s. ISBN 0-19-855723-. info
- Exner, Otto. *Struktura a fyzikální vlastnosti organických sloučenin*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1985. 275 s. info
- Holba, Vladislav. *Fyzikálno-chemické vlastnosti atomů a molekul a*. 1. vyd. Bratislava : Slovenské pedagogické nakladatel'stvo, 1980. 282 s. info
- Volkenštejn, M. V. *Struktura a fyzikální vlastnosti molekul*. Translated by Jiří Dvořák. 1. vyd. Praha : Nakladatelství České akademie věd, 1962. 721 s. info

C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules

Vyučující: [doc. Mgr. Lukáš Židek Ph.D.](#), [doc. RNDr. Radovan Fiala CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (přif plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: The course will provide introduction to modern NMR techniques which can be applied to extract structural information for small and mid-size biological macromolecules - peptides, proteins, DNA and RNA oligonucleotides. Experimental procedures and computational protocols for determination of three-

dimensional structures and dynamics based on NMR data will be discussed. Students who finish the course successfully will understand principles of NMR and its applications to biochemical problems described in original research articles, to analyze NMR experiments and design their modification, to choose the correct approach of solving a given problem, and to combine results of individual approaches to obtain a complex picture of the studied problem. The course is designed so that students who continue to study in a PhD program will be able to apply the learned skills in their own research projects.

Osnova:

- 1. NMR as a tool for structure biology 2. Basic NMR Experiments 3. Key to biomolecular NMR: Idea of correlation 4. First step in NMR of proteins 5. Second step in determination of protein structure 6. From spectra to structure 7. Special features of nucleic acid NMR 8. Nucleic acid structure by NMR 9. Molecules are not rigid 10. From relaxation to molecular motions 11. Molecules are not alone 12. Beyond small soluble biomolecules

Výukové metody: Lectures combining explanation of basic ideas with analysis of model examples, computer simulations of the discussed topics.

Metody hodnocení: Oral examination in a form of discussion of problems solved by the student.

Literatura:

- *Protein NMR spectroscopy :principles and practice.* Edited by John Cavanagh. 2nd ed. Amsterdam : Elsevier, 2007. xxv, 885 s. ISBN 978-0-12-164491. info

C6790 Hmotnostní spektrometrie

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Brož Ph.D.](#), [prof. RNDr. Jan Vřešťál DrSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Obsahem kursu jsou následující témata: Principy a vývoj hmotnostní spektrometrie. Metody ionisace a desorpce: Ionisace elektrony, metody chemické ionisace, ionisace polem a desorpce polem. Ionisace laserem, MALDI. Ionisace bombardováním rychlými atomy a ionty. Principy separace iontů; v hmotnostní spektrometrii: Sektorové hmotnostní spektrometry, detekce metastabilních iontů; dynamické hmotnostní spektrometry. Spojení chromatografických metod s hmotnostní spektrometrii: GC-MS, LC-MS, termosprej, elektrosprej. Analýza povrchů; pevných látek: SI-MS, Stopová analýza: SS-MS, ICP-MS. Sonda pro přímý vstup, membránový vstup, vysokoteplotní hmotnostní spektrometrie, hledání v knihovných spekter. Cílem kurzu je poskytnout posluchačům základní informace o hmotnostní spektrometrii, které jim umožní orientaci při použití metody v praxi.

Osnova:

- 1. Postavení hmotnostní spektrometrie mezi spektrometrickými metodami. Fyzikálně-chemické a analytické informace. Základní a molekulární pík. 2. Ionizace nárazem elektronů. Podmínky ionizace nárazem elektronů. Kritické potenciály, fragmentace. Statistická teorie fragmentace. Ionizace polem. 3. Hlavní typy reakcí monomolekulárního rozpadu iontů organických sloučenin. Štěpení vazeb. Přesmyky. 4. Metody chemické ionisace (CI a NCI). Ionisace při atmosférickém tlaku (API a APCI). Fragmentace quasimolekulárních iontů. Kondenzační reakce. 5. Metody desorpce: elektrickým polem, laserem, plazmou 252Cf, rychlými atomy a ionty. 6. Hmotnostní analyzátoři I. Základní pojmy vakuové techniky. Sektorové hmotnostní spektrometry. Přístroje s dvojitou fokusací. Detekce metastabilních iontů. 7. Hmotnostní analyzátoři II. Dynamické analyzátoři. Kvadrupólové hmotnostní spektrometry. Monopólový analyzátor. Iontová past. Iontová cyklotronová rezonance. Průletové hmotnostní spektrometry. Detektory iontů. 8. Kombinace chromatografických metod s hmotnostní spektrometrií I. Plynová chromatografie - GC/MS, SFC/MS, TLC/MS. 9. Kombinace chromatografických metod s hmotnostní spektrometrií II. Kapalinová chromatografie - LC/MS. Termosprej, elektrosprej, particle beam. 10. Tandemová hmotnostní spektrometrie. Srážková aktivace. Uspořádání sektorových tandemových spektrometrů. Iontová past jako tandem. Interpretace hmotnostních spekter. 11. Kvantitativní hmotnostní spektrometrie organických sloučenin. Typová spektra. Isotopické píky. Zředovací analýza. 12. Hmotnostní spektrometrie v anorganické chemii. Analýza povrchů pevných látek - SIMS. Stopová analýza - SSMS, ICP-MS. 13. Vysokoteplotní hmotnostní spektrometrie. Analýza rovnovážných tenzí par. Získávání termodynamických údajů. Hmotnostní spektrometrie pro pevné látky (DIP). 14. Netradiční hmot. spektrometrie: membránový vstup (MIMS), elektrochemický vstup (DEMS). Správná laboratorní praxe. Knihovny spekter. Současné komerční hmotnostní spektrometry.

Výukové metody: Teoretická příprava formou přednášek s užitím mnoha praktických příkladů.

Metody hodnocení: Výuka probíhá týdně, ukončení je ústní zkouškou. Součástí výuky jsou exkurze k zařízením GC-MS a praktické analýzy hmotnostních spekter.

Literatura:

- Barker, James. *Mass spectrometry : analytical chemistry by open learning*. Edited by David J. Ando. 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 1998. xxii, 509. ISBN 0-471-96764-5. info

C6800 Multinukleární NMR spektroskopie

Vyučující: [prof. RNDr. Jiří Pinkas Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: V přednášce jsou diskutovány základní měřitelné veličiny NMR spekter, jako stínící konstanty a chemické posuny, skalární interakční konstanty a relaxační časy. Dále jsou zdůrazněny vlivy chemických a fyzikálních faktorů, strukturních parametrů a vliv chemické výměny na hodnoty těchto veličin. Praktické příklady a problémy jsou uvedeny z oblasti multinukleární NMR spektroskopie anorganických látek. Studenti se v tomto kurzu naučí: Určit prvky symetrie v molekule a předpovědět počet očekávaných signálů ve spektrech přítomných NMR aktivních jader. Odhadnout přibližnou hodnotu chemického posunu ve spektru sledovaného jádra v závislosti na struktuře molekuly a elektronickém okolí jádra. Určit očekávanou multiplicitu signálu sledovaného jádra v závislosti na interakci s okolními jádry. Odhadovat přibližnou velikost interakčních konstant v závislosti na vazebných a strukturních poměrech v molekule. Posoudit jaderné, elektronické a strukturní vlivy na relaxační rychlosti jader. Posoudit vliv chemických a fyzikálních faktorů a strukturních parametrů na možnost chemické výměny a ovlivnění počtu a tvaru signálů ve spektrech.

Osnova:

- 1. Historický úvod. Základní pojmy: jaderný spin, magnetický moment, magnetogyrický poměr, isotopické zastoupení, magnetizace, populace, Larmorova frekvence. 2. Stínící konstanta, diamagnetické a paramagnetické stínění, Ramseyův vzorec. Lokální a nelokální vlivy. Chemický posun, referenční standardy. Rozsah chemických posunů. 3. Parametry ovlivňující stínící konstantu: oxidační číslo, koordinační číslo, náboj, symetrie, HOMO-LUMO rozštěpení, elektronegativita, normální a inverzní halogenová závislost, nefelauxetická a spektrochemická řada. 4. Korelace chemických posunů s vazebnými délkami, úhly, UV maximy, IR silovými konstantami, Hammettovými sigma konstantami. 5. Vlivy na chemický posun: isotopové efekty, SIIS, magnetická anisotropie chemických skupin, teplota, rozpouštědlo, ASIS. 6. Satelitní signály, isotopomery, výpočet isotopického zastoupení. 7. Chemická ekvivalence a symetrie molekul. Prochirální a C2 skupiny. Homotopická, enantiotopická, diastereotopická a heterotopická jádra. Chirální rozpouštědla, posuvová činidla. 8. Dipolární interakce. NMR spektroskopie v pevné fázi. 9. Skalární interakce. Interakční konstanta, Diracův model, Pople-Santryho vzorec, redukovaná interakční konstanta. Vlivy na interakční konstantu: s-charakter, hybridizace, elektronegativita, koordinační číslo, vazebné úhly, dihedrální úhly, Karplusova rovnice. 10. Konstrukce multiplétů. Notace spinových systémů. Jednoduché spinové systémy: AB, ABX, AA'X, AA'XX'. Simulace spekter. 11. Relaxace. Relaxační časy T1 a T2. Korelační čas. Extreme narrowing limit. Inversion Recovery a Spin Echo metody. 12. Relaxační mechanismy: dipolární, anisotropie chemického posunu, spinová rotace, skalární relaxace, kvadrupolová, paramagnetická. NOE. 13. Dynamická NMR spektroskopie. Chemická výměna. Ekvivalentní a neekvivalentní systémy. Simulace dynamických NMR spekter.

Výukové metody: Přednáška sestává ze 14 lekcí po 50 minutách. Materiály k přednášce, jako jsou prezentace, doporučené články z literatury, tabulky, jsou vloženy do ISu. V relevantních případech se stávají součástí kurzu i přednášky hostujících profesorů v programu INNOLEC.

Metody hodnocení: Během semestru jsou zadány 3 hodnocené domácí úkoly. Na konci semestru každý student přednese krátkou prezentaci na vybrané téma z NMR spektroskopie. Písemná závěrečná zkouška hodnocena max. 100 body, minimum dosažených bodů je 50. Váhy hodnocení: závěrečná zkouška 75%, domácí úlohy 15%, prezentace 10%.

Literatura:

- *NMR and the periodic table*. Edited by Robin Kingsley Harris - Brian E. Mann. London : Academic Press, 1978. 459 s. ISBN 0-12-327650-0. info
- Goljer, Igor - Liptaj, Tibor. *Nové metody FT NMR spektroskopie kvapalín*. 1. vyd. Bratislava : VEDA vydavateľstvo Slovenskej akadémie vied, 1986. 181 s. info
- Wehrli, F. W. - Wirthlin, T. *Interpretation of carbon-13 NMR spectra*. London : Heyden, 1980. 310 s. ISBN 0-85501-207-2. info

- *Two-dimensional NMR spectroscopy :applications for chemists and biochemists*. Edited by William R. Croasmun - Robert M. K. Carlson. 2nd ed. New York : VCH Publishers, 1994. xxii, 958. ISBN 1-56081-664-3. info
- Braun, Siegmund - Kalinowski, Hans - Otto - Berger, Stefan. *150 and more basic NMR experiments :a practical course*. 2nd exp. ed. Weinheim : Wiley-VCH, 1998. 595 s. ISBN 3-527-29512-7. info
- Breitmaier, Eberhard. *Structure elucidation by NMR in organic chemistry :a practical guide*. Translated by Julia Wade. Chichester : John Wiley & Sons, 1993. 265 s. ISBN 0-471-93381-3. info
- Schraml, Jan. *Dvourozměrná NMR spektroskopie*. 1. vyd. Praha : Academia, 1987. 130 s. info
- Sanders, Jeremy K. M. *Modern NMR spectroscopy :a workbook of chemical problems*. 2nd ed. Oxford : Oxford University Press, 1993. 127 s. ISBN 0-19-855812-0. info
- Farrar, Thomas C. - Becker, Edwin D. *Pulse and Fourier Transform NMR : Introduction to Theory and Methods*. New York : Academic Press, 1971. 115 s. info
- Friebolin, Horst. *Basic one- and two-dimensional NMR spectroscopy*. 3. vyd. Weinheim : Wiley-VCH, 1998. 385 s. ISBN 3527295135. info
- Hájek, Milan. *Kvantitativní FT NMR spektroskopie v chemické praxi*. 1. vyd. Praha : Academia, 1989. 164 s. ISBN 80-200-0096-8. info
- Macomber, Roger. *A complete introduction to modern NMR spectroscopy*. New York, USA : John Wiley and Sons, 1998. 382 s. ISBN 0471157368. info
- Derome, Andrew E. *Modern NMR techniques for chemistry research*. Oxford : Pergamon, 1987. xvii, 280. ISBN 0-08-032513-0. info

C6815 Struktura a vlastnosti polymerů

Vyučující: [doc. Ing. Vladimír Šindelář Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Přednáška seznamuje s možnými strukturami polymerů a metodami jejich určení a odrazem struktury ve fyzikálních a užitných vlastnostech a jejich stanovení.

Osnova:

1. Úvod do předmětu Struktura a vlastnosti polymerů.
2. Molekulové hmotnosti a způsoby jejich stanovení.
3. Distribuce molárních hmotností, index neunirfomity (polydisperzity).
4. Konstituce polymerů a kopolymerů.
5. Konfigurace a konformace polymerního řetězce.
6. Roztoky polymerů, Floryho-Hugginsova rovnice.
7. Fyzikální stavy polymerů. Plastický, kaučukový, krystalický, sklovitý stav.
8. Polymery v krystalickém stavu.
9. Polymerní sítě.
11. Struktura a vlastnosti přírodních polymerů.
12. Změny struktury při stárnutí a zpracování polymerů.
13. Kombinační přístup při hodnocení struktury a vlastností plastů.
14. Souhrn

Výukové metody: Přednáška

Metody hodnocení: Písemná a ústní zkouška

Literatura:

- B. Meissner, V. Zilvar, Fyzika polymerů, SNTL/Alfa 1987
- S. F. Sun, Physical Chemistry of Macromolecules, John Wiley&Sons, Inc. 1994
- J. Pouchly, Fyzikalni chemie makromolekularnich a koloidnich soustav, VSCHT Praha, 1998
- L. Mleziva, J Kalal, Zaklady makromolekularni chemie. SNTL/Alfa, 1986
- H.-G. Elias, An Introduction to Polymer Science, Weinheim 1997
- P. Munk, Introduction to Macromolecular Science, John Wiley&Sons, 1989

C6830 Radioekologie

Vyučující: [Mgr. Jiří Křivohlávek](#)

Rozsah: 1/0/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: pochopit roli ionizujícího záření a jaderných materiálů ve vědě, průmyslu a vojenství; znát historii objevu a použití ionizujícího záření a jaderných materiálů;

bude znát negativní a pozitivní účinky ionizujícího záření na živé i neživé objekty; bude znát problematiku radioaktivních odpadů a emisí radioaktivních látek do životního prostředí;

Osnova:

- 1. Obecné pojmy
- 1.1. Symbolika
- 1.2. Pojmy
- 1.3. Hmotnost atomu
- 1.4. Energie
- 2. Radioaktivita
- 2.1. Hmotnostní podmínka
- 2.2. Druhy radioaktivních přeměn
- 2.3. Kinetika radioaktivních přeměn
- 2.4. Přírodní RN
- 3. Ionizující záření
- 3.1. Vlastnosti ionizujícího záření
- 3.2. Zdroje IZ
- 3.3. Ochrana před IZ
- 3.4. Detekce IZ
- 3.5. Biologické účinky IZ
- 4. Radioaktivita a ionizující záření v životním prostředí
- 4.1. Kosmické záření a kosmogenní RN
- 4.2. Přírodní RN s dlouhým poločasem přeměny
- 4.3. Radon
- 4.4. Jaderné elektrárny
- 4.5. Havárie jaderných reaktorů
- 4.6. Nehody při práci s radioaktivními látkami
- 4.7. Pokusné jaderné a termonukleární výbuchy
- 4.8. Umělé zdroje IZ
- 4.9. Radioaktivní odpady

Výukové metody: Přednáška a diskuze

Metody hodnocení: Přednáška, zkouška ústní či písemná.

Literatura:

- J. Hála, radioaktivita, ionizující záření, jaderná energie. Brno, 1998.
- J. Beneš, Radioaktivní zamoření biosféry. Praha, 1974. J. Jandl, I. Petr, Ionizující záření v životním prostředí. Praha, 1988.

C6850 Chromatografické metody II

Vyučující: [doc. RNDr. Zdeněk Šimek CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (plus ukončení). Ukončení: zk.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: - využít teorie analytické separace k charakterizaci a pochopení metod používajících chromatografických principů; - pochopit a objasnit principy instrumentace a technické řešení metod tenkovrstvé chromatografie, metod využívajících současně principů chromatografie a analytické elektromigrace, metod inverzní chromatografie a kombinovaných separačních a souvisejících analytických technik; - posoudit možnosti kombinace chromatografických a jiných separačních a analytických technik pro zvýšení identifikační účinnosti a zlepšení limitů kvantifikace vyvíjených analytických postupů; - aplikovat teorii chromatografie k charakterizaci analytických fázových systémů, povrchu pevných materiálů a vázaných fází a vzájemných interakcí analytů se složkami fázových systémů;

Osnova:

- Podle týdnů v semestru
- 1.-2. Tenkovrstvá chromatografie. Principy. Instrumentace. Aplikace.
- 3.- 6. Kapilární elektroforéza (CE) a kapilární elektrochromatografie (CEC). Pohyb iontu v elektrickém poli, základní rovnice, pojmy a parametry. Principy CE technik a principy CEC, instrumentace
- 7.- 8. Inverzní chromatografie.
- 9.- 10. Kombinované techniky v separační analýze.

- 11.-12. Trendy v chromatografii. Vícerozměrová chromatografie. Vysoce rychlá chromatografie. Mikroseparace.

Výukové metody: Výuka je vedena jako přednáška s prezentací v Powerpointu. Studenti obdrží před každou přednáškou kopie jednotlivých obrazů pro vpisování vlastních poznámek a dotazů. Srozumitelnost v obtížných partiích je ověřována interaktivně

Metody hodnocení: Přítomnost na přednášce není povinná ale doporučena pro snadné plynulé zvládnutí a pochopení látky. Nabyté vědomosti jsou ověřeny ústní zkouškou. Tři vzájemně související oblasti jsou obsahem odborné diskuse u ústní zkoušky

Literatura:

- Poole, C. F. - Poole, S. K. *Chromatography Today*. 5th Impression. Amsterdam : Elsevier, 1997. ISBN 0-444-89161-7. info
- *Chromatography 6th edition :fundamentals and applications of chromatography and related differential migration methods*. Edited by E. Heftmann. 1st ed. Amsterdam : Elsevier, 2004. xlii, s. 5. ISBN 0-444-51106-7. info
- *Electrokinetic chromatography :theory, instrumentation and applications*. Edited by Ute Pyell. Hoboken, N.J. : John Wiley & Sons, 2006. xii, 539 p. ISBN 0-470-87102-4. info
- Lindsay, Sandie. *High performance liquid chromatography*. 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 1992. xxii, 337. ISBN 0-471-93180-2. info
- Lindsay, S. *High Performance Liquid Chromatography*. 2nd Edit. Chichester : J. Wiley, 1992. Analytical Chemistry by Open Learning (Series). ISBN 0 471 93115 2. info

C6860 Moderní metody analýzy organických polutantů

Vyučující: [doc. RNDr. Jana Klánová Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (plus ukončení). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: - dále rozvinout koncept chemické analýzy vzorků životního prostředí. - aplikovat vědomosti z environmentální chemie a toxikologie pro úspěšné plánování analytických experimentů. - shrnout poznatky o chování polutantů v přírodních matricích a jejich distribuci mezi jednotlivé fáze. - připomenout transportní procesy na površích a mezi fázemi. - rozlišit pojmy přítomnost, dostupnost a aktivita chemických látek v přírodních matricích. - analyzovat různé potřeby a důvody pro environmentální analýzy. - přiřadit k jednotlivým zadáním nejvhodnější vzorkovací, extrakční, separační a identifikační metody. - rozebrat pojem „moderní“ nebo „pokročilé“ metody ve smyslu nových přístupů, nových technik, nových polutantů a interdisciplinárních návazností. - srovnat skupiny „nových“ polutantů (bromované zpomalovače hoření, perfluorované látky, chlorované parafíny, léčiva) s historickými polutanty (polychlorované dioxiny a furany) a upozornit na analytické komplikace. - využít možnosti nových vzorkovacích (pasivní), extrakčních (zrychlená extrakce, extrakce kapalinou v superkritickém stavu), separační a identifikační metody (kombinace vysokoúčinné separace s novými technikami hmotnostní spektroskopie) ke splnění nových požadavků. - aplikovat poznatky z jiných oborů, propojit s bioanalytickými či toxikologickými metodami.

Osnova:

1. Aplikace znalostí z environmentální chemie a toxikologie pro úspěšné plánování terénních a laboratorních experimentů
2. Chování polutantů v přírodních matricích, jejich distribuce mezi fáze, procesy fázové výměny a děje na površích
3. Co nás zajímá? Přítomnost, dostupnost nebo aktivita organických látek v prostředí?
4. Nové pasivní techniky pro vzorkování biodostupné frakce organických polutantů z ovzduší a z vody. Rovnovážné vzorkování jako prostředek pro stanovení aktivity chemických látek
5. Selektivní metody extrakce (sekvenční extrakční techniky, extrakce kapalinou v superkritickém stavu, vodou za vysokého tlaku)
6. Nové separační a identifikační techniky (kombinace plynové chromatografie s vysokorozlišovací hmotnostní spektroskopií (HRMS), vysokoúčinná kapalinová chromatografie ve spojení s hmotnostní spektroskopií (LC/MS)). Nové hmotnostní analyzátoři pro identifikace specifických látek (trojitý kvadrupol, Q-trap, Fourierova transformace, MALDI)
7. Stopová analýza významných environmentálních polutantů a jejich metabolitů a její problémy (analýza polychlorovaných dioxinů a furanů)
8. Nové environmentální polutanty: bromované zpomalovače hoření, perfluorované látky, chlorované parafíny s krátkým a středním řetězcem, steroidní látky, léčiva
9. Bioanalytické metody

- 10. Interdisciplinární přístupy (geologie, mineralogie, geochemie, atmosférická chemie, fotochemie, meteorologie, klimatologie, toxikologie, biochemie, molekulární biologie) k interpretaci analytických dat

Výukové metody: Kurs je organizován formou přednášky jednou týdně.

Metody hodnocení: ústní zkouška

Literatura:

- Fifield, F. W. - Haines, P. J. *Environmental Analytical Chemistry*. (Eds.). London : Blackie Academic & Professional, 1995. ISBN 0-7514-0052-1. info
- Skoog, Douglas A. - Leary, James J. *Principles of instrumental analysis*. 4th ed. Fort Worth : Saunders College Publishing, 1992. xii, 700 s. ISBN 0-03-023343-7. info
- Barceló, D. *Environmental Analysis. Techniques, Applications and Quality Assurance*. Amsterdam : Elsevier, 1993. Techniques & Instrumentation Anal. Chem., Vol. 13. ISBN 0-444-89648-1. info

C6950 Chemická exkurze

Vyučující: [RNDr. Slávka Janků Ph.D.](#)

Rozsah: 0/0/0. 1 týden. 0 kr. Ukončení: z.

Cíle předmětu: Exkurze do podniků s chemickou výrobou v České republice.

Osnova:

- Návštěva celkem 10 podniků se zaměřením na organickou, anorganickou a biochemickou výrobu.

Výukové metody: Exkurze v zařízeních mimo Masarykovu univerzitu.

Metody hodnocení: Zápočet

Literatura:

doporučená literatura

- Hovorka, František. *Technologie chemických látek*. Praha : Vydavatelství VŠCHT Praha, 2005. 180 s. ISBN 80-7080-588-9. URL info
- Hovorka, František. *Technologie chemických látek*. Vyd. 1. Praha : Vydavatelství VŠCHT, 2005. 180 s. ISBN 80-7080-588-9. info

C6960 Odborná praxe

Vyučující: [doc. Ing. Vladimír Šindelář Ph.D.](#)

Rozsah: 0/0/0. 3 týdny. 0 kr. Ukončení: z.

Cíle předmětu: Hlavním cílem odborné praxe je seznámení se s provozem chemického pracoviště výzkumného charakteru mimo Masarykovu univerzitu nebo výrobního provozu/laboratoře.

Osnova:

- Konkrétní náplň odborné praxe je stanovena ve spolupráci s vybraným externím pracovištěm.

Výukové metody: Odborná praxe v zařízeních mimo Masarykovu univerzitu.

Metody hodnocení: Zápočet

Literatura:

- Büchel, Karl H. - Moretto, Hans-Heinrich - Woditsch, Peter. *Industrial inorganic chemistry*. 2 rev. ed. Weinheim : Wiley-VCH, 2000. xxv, 642 s. ISBN 978-3-527-29849. info

C7000 Oborový seminář I

Vyučující: [doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.](#)

Rozsah: 0/2/0. 2 kr. Ukončení: z.

Cíle předmětu: Zprávy o postupu a prezentace výsledků samostatných projektů, diplomových a disertačních prací. Informace z literatury o nejnovějších výsledcích a vývoji v oboru. Referátové zpracování přehledných článků. Studenti se naučí správně interpretovat vědecké poznatky z literatury a prezentovat výsledky vlastní výzkumné práce.

Osnova:

- Příspěvky studentů, vyučujících a externistů.

Výukové metody: Diskuse, četba, prezentace, skupinové projekty, domácí úlohy atd.

Metody hodnocení: Zápočet je udělen za účast na semináři a aktivní vystoupení studenta.

Literatura:

- *Journal of the American Chemical Society*. 2009. ISSN 0002-7863. info
- Current journals specified by the lecturers
- Odborná literatura dle zaměření semináře
- *Angewandte Chemie International Edition*. 2009. ISSN 1433-7851. info

C7001 Diplomová práce I

Vyučující: vedoucí práce

Rozsah: 0/0/3. 3 kr. Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Předmět diplomová práce je koncipován jako kurz motivující studenta ke zpracování výsledků vlastního výzkumu ve formě diplomové práce splňující veškeré požadavky na ni kladené. Absolvování tohoto kurzu a kurzů navazujících zajistí, že student odevzdá diplomovou práci odsouhlasenou vedoucím. Navíc student hlouběji porozumí výzkumným metodám používaným v dané oblasti, bude schopen samostatně výzkumné činnosti a bude si uvědomovat etické aspekty vědecké práce.

Osnova:

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

Výukové metody: Vlastní rešeršní činnost, výzkumná práce v laboratoři, konzultace s vedoucím.

Metody hodnocení: Zápočet je udělený za úspěšný postup v přípravě práce.

Literatura:

- Eco, Umberto - Seidl, Ivan. *Jak napsat diplomovou práci*. Olomouc : Votobia, 1997. 271 s. ISBN 80-7198-173-7. info
- Literatura dle doporučení vedoucího diplomové práce (Literature according to the recommendation of the thesis supervisor)

C7031 Atomová spektrometrie

Vyučující: [prof. RNDr. Viktor Kanický DrSc.](#), [prof. RNDr. Vítězslav Otruba CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Základní pojmy o záření, Planckův zákon, Einsteinovy zákony, metrologie. Disoerzní optické moduly, základy instrumentace. Emisní a absorpční spektrometrie atomů, iontů a molekul - emise plamene, oblouku, jiskry, duté katody, doutnavých vábojů, laserů, plazmat inertních plynů.

Osnova:

- 1. Elektromagnetické záření, elektromagnetická vlna, rychlost ve vakuu, Poyntigův vektor, Planckův vyzařovací zákon, foton. Interakce záření s hmotou. Einsteinovy zákony pro absorpci a emisí záření. Metrologie elektromagnetického záření. Energetické veličiny zářivý tok, hustota zářivého toku, zářivá energie, hustota zářivé energie, intenzita vyzařování, zář. Integrální a monochromatické (spektrální) veličiny. Fotometrické veličiny světelný tok, svítivost, jas, osvětlení. 2. Měřicí zdroje elektromagnetického záření. Zdroje IR-VIS-UV se spojitým spektrem (tepelné zářiče popsané Planckovým vyzařovacím zákonem), UV-RTG (brzdné záření). Plazmatické zdroje spojitého spektra IR-VIS-UV (výbojky D2, Xe). Zdroje čárového spektra VUV-UV-VIS (nízkotlaké výbojky) a RTG (rentgenky, (-zářiče, synchrotron). Polovodičové zdroje záření (LED). Zdroje koherentního záření (plynové, barvivové a polovodičové lasery). 3. Disperzní prvky pro kmitočtovou analýzu záření v oblasti IR-VIS-UV (hranoly, mřížky, interferometry). Monochromátory a polychromátory UV - VIS, optické uspořádání, vlastnosti. 4. Detektory záření UV-VIS založené na tepelných účincích (termočlánky.), na vnějším a vnitřním fotoefektu (fotonky, fotonásobiče, fotorezistory, fotovoltaické články). Plošné integrované detektory (CCD, CID..) 5. Atomová absorpční spektrometrie (AAS). Princip AAS, absorpční a emisní profily čar atomů, Bouger-Lamber-Beerův zákon v AAS. Atomizátory v AAS (plameny, elektrotermické atomizátory. Spektrální rušení, neselektivní absorpce záření, příčiny a metody korekce. Nespektrální interference. 6. Optická emisní spektrometrie UV-VIS (OES). Přehled metodik OES. Tepelná, elektronová a zářivá excitace molekul, atomů a iontů. Boltzmannův zákon. Ionizace a Sahova rovnice. Excitační zdroje v OES. Teoretické základy emise a absorpce záření,

Kirchhoffův zákon. Průběh závislosti emise záření na koncentraci analytu. 7. Plamenová emisní spektrometrie molekul a atomů (FES). Molekulová a atomová spektra. Instrumentace v FES: plameny, transport vzorku, separace a detekce záření. Spektrální a nespektrální interference. Analytické vlastnosti FES. 8. Oblouková a jiskrová OES, klasická varianta emisní spektrografie. Jiskrové a obloukové generátory, charakter obloukového a jiskrového spektra. Spektrografy s fotografickou detekcí, spektrometry s fotoelektrickou detekcí, kvantometry. Využití vakuové oblasti UV spektra. Analytické vlastnosti a oblast použití. 9. Indukčně vázané plazma (ICP) v OES. Princip funkce, excitační mechanismy v argonovém plazmatu ICP. Spektrální vlastnosti ICP z analytického hlediska, kalibrační závislosti, rozsah, linearita, Meze detekce. Spektrální interference a další rušivé vlivy v ICP OES. Hmotnostní ICP spektrometry. 10. Výboje za sníženého tlaku v OES. Izotermní a neizotermní plazma. Geisslerovy trubice a analýza plynů. Výboj v duté katodě, aplikace ve stopové a izotopové analýze. Grimmův výboj, spektrální vlastnosti a konstrukční uspořádání. Analýza povrchových vrstev a aplikace v technické praxi. Hmotnostní spektrometry s neizotermním plazmatem. 11. Atomová fluorescenční spektrometrie. Princip metody, analytické parametry (citlivost, meze detekce, koncentrační rozsah). 12. Elementární analýza látek rentgenovými paprsky. Vznik primárního a fluorescenčního RTG záření. Serie čar a jejich symbolika, nezářivé pochody v atomech (sekundární a Augerovy elektrony). RTG fluorescenční vlnové disperzní spektrometry simultánní a sekvenční, jejich analytické vlastnosti. Energodisperzní RTG spektrometry a aplikace. 13. Zářivé interference v RTG spektrometrii a jejich korekce. Absorpční RTG spektrometrie a její analytické aplikace. Nezářivé interference a jejich eliminace přípravou vzorku a matematickou korekcí. Praktické aplikace. 14. RTG spektrometrie s buzením záření nabitými částicemi. Elektronová mikrosonda a rastrovací elektronový mikroskop jako zdroje primárního RTG záření a jejich aplikace pro lokální mikroanalýzu. Princip a analytické využití buzení RTG záření protony a ionty.

Výukové metody: teoretická příprava

Metody hodnocení: přednáška, ústní zkouška

Literatura:

- *Analytická příručka. Díl I [Zýka, 1988].* Edited by Jaroslav Zýka. 4. upr. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 678 s. info
- Kanický, Viktor - Otruba, Vítězslav - Sommer, Lumír - Toman, Jiří. *Optická emisní spektrometrie v indukčně vázaném plazmatu a vysokoteplotních plamenech.* 1. st. Praha : Academia, 1992. 152 s. Pokroky chemie 24. ISBN 80-200-0215-4. info
- *Analytická příručka. Díl II [Zýka, 1988].* Edited by Jaroslav Zýka. 4. upr. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 831 s. info

C7041 Molekulová spektrometrie

Vyučující: [prof. RNDr. Viktor Kanický DrSc.](#), [Mgr. Petr Táborský Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Klasifikace spektroskopických metod, analytické a strukturní aspekty, spektrální rozsahy a procesy. Instrumentace, monochromatizace, zpracování signálu. Molekulová absorpční spektrofotometrie (UV/Vis), Bouguer-Lambert-Beerův zákon. Infračervená spektroskopie, Ramanova spektroskopie. Luminiscence. Mikrovlnná spektroskopie. Analytické aspekty magnetických rezonančních metod. Analytická refraktometrie.

Osnova:

- 1. Klasifikace optických analytických metod, rozdělení metod molekulové spektroskopie, analytické a strukturní aspekty optických metod, interakce hmota-záření. Fotometrie, jednotky. 2. Molekulová absorpční spektroskopie v ultrafialové a viditelné oblasti: podstata a charakter spekter UV a Vis, molekulové orbitály, symbolika a členění molekulových termů, multiplicita termů, elektronické stavy molekul. 3. Typy elektronických přechodů v molekulách a jejich projevy ve spektrech, chemická teorie barevnosti (chromofory a auxochromy), tvar a vibrační struktura absorpčních páسů, Franckův-Condonův princip a vibronické přechody. 4. Elektronická spektra důležitých tříd látek: alifatické nenasycené uhlovodíky, deriváty alifatických uhlovodíků, aromatické uhlovodíky, jejich heteroanaloga a substituční deriváty, organická barviva, anorganické ionty a komplexy kovů, spektra přenosu náboje. 5. Vnitřní a vnější efekty ovlivňující elektronická spektra: sterické efekty, tautomerní rovnováhy, pH, rozpouštědla. Empirické výpočty elektronických spekter. Instrumentace UV a Vis spektroskopie. 6. Použití UV-Vis spektroskopie: určování struktury organických látek, kvalitativní analýza. Bouguer-Lambert-Beerův zákon, kvantitativní analýza. Analytické využití rozptylu: turbidimetrie, nefelometrie, difusní reflektance, titrační varianty optických metod. 7. Luminiscenční spektroskopie: podstata,

klasifikace. Fluorimetrie, fosforimetrie, vztah struktura-spektrum, Instrumentace. Elektro-, bio-, termo-, chemiluminiscence, luminiscence v pevném stavu (kandoluminiscence), laserová fluorimetrie. Analytické aplikace. 8. Infračervená spektroskopie. podstata a charakter infračerveného spektra, molekulové vibrace a vznik vibračních spekter, rotační hladiny molekul a rotační spektra, rotačně-vibrační spektra, výběrová pravidla a intenzita absorpčních pásů, vibrační frekvence a vlastnosti molekul. 9. Faktory ovlivňující charakteristické vibrace: vliv skupenství a rozpouštědla, vliv vodíkové vazby, vliv hmotnosti atomů, elektrické vlivy, sterické vlivy, pnutí kruhu, konformace, vibrační interakce. Infračervená spektra organických látek. Instrumentace a pracovní technika. 10. Ramanova spektroskopie: podstata a charakter spekter, instrumentace, pracovní technika a použití. Mikrovlnná spektroskopie. 11. Analytické aplikace infračervené a Ramanovy spektroskopie. 12. Magnetická rezonanční spektroskopie: spektroskopie nukleární magnetické rezonance, podstata NMR spekter a instrumentace, chemický posun, intenzita rezonančních signálů, štěpení signálů, spektra 1. řádu, spinové systémy, spektra vyšších řádů. Vliv chemické výměny na spektrum NMR. 13. NMR spektra jader těžších atomů. Použití NMR spektroskopie. Spektroskopie elektronové paramagnetické rezonance. 14. Analytická refraktometrie. Optická rotační disperze, cirkulární dichroismus. Mössbauerova spektroskopie. Fotoakustická spektrometrie.

Výukové metody: teoretická příprava

Metody hodnocení: Přednášky, ústní zkouška s písemnou přípravou.

Literatura:

- *Analytická příručka. Díl I [Zýka, 1988].* Edited by Jaroslav Zýka. 4. upr. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 678 s. info
- *Analytická příručka. Díl II [Zýka, 1988].* Edited by Jaroslav Zýka. 4. upr. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 831 s. info

C7050 Elektroanalytické metody

Vyučující: [doc. RNDr. Libuše Trnková CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Cílem výuky je seznámit studenty se základními elektroanalytickými metodami a ukázat jim, jaké jsou možnosti jejich využití v analytické praxi. Kromě klasifikace metod (potenciometrie, polarografie a voltametrie, cyklická voltametrie, chrono-potenciometrie a chronoamperometrie, elektrogravimetrie, coulometrie, rozpouštěcí techniky, konduktometrie, ampérometrické a konduktometrické titrace) a elektroodových systémů (rtuťové, pevné, pastové a chemicky modifikované elektrody) je důraz kladen na prezentaci fyzikálně-chemických principů těchto metod a na jejich uplatnění v chemické analýze. Jinými slovy studenti absolvováním tohoto kurzu budou vybaveni znalostmi základů elektroanalytických metod pro laboratoř základního a aplikovaného výzkumu.

Osnova:

- 1. Úvod - krátký historický přehled, literatura. Elektroanalytická metoda, použité elektrické veličiny, základní pojmy (elektrochemický článek, elektroda, elektrodový děj, elektroaktivní částice, migrace, difúze, konvekce, stacionární děj, elektrochemický potenciál). Přenos elektronu, Fermiho energetická hladina. Klasifikace elektroanalytických metod. 2. Potenciometrie. Potenciál, elektromotorická síla (EMS), elektrodový potenciál, Nernstova rovnice, význam standardního potenciálu, způsoby měření EMS, pH- a pX-metry, indikační elektrody a referentní elektrody. Potenciometrické titrace, titrační křivky a několik způsobů jejich vyhodnocení. 3. Iontově selektivní elektrody - ISE. Definice a klasifikace ISE, elektrochemická membrána, transfer iontů, Donnanův a Nernstův potenciál, materiály membrán a konstrukce ISE, pevné a kapalné membrány, plynové a enzymové ISE, kalibrace ISE a jejich selektivita, Nikolského rovnice a metody stanovení koeficientu selektivity, praktické využití ISE. Měření pH, konvenční stupnice pH, měrné elektrody pro měření pH, kalibrace pH-metru. 4. Elektrolýza. Základní pojmy (galvanický článek kontra elektrolyzér, anoda, katoda, polarizace elektrod, přepětí, ideálně polarizovatelná a ideálně nepolarizovatelná elektroda, depolarizátor). Polarizační křivky a jejich záznam, materiály indikačních elektrod. Butler-Volmerova rovnice, Tafelova a Cottrellova rovnice. 5. Elektrogravimetrie. Princip metody, pracovní a pomocné elektrody, vlastnosti vyloučeného povlaku, potenciostat, galvanostat, elektrogravimetrie za konstantního napětí nebo proudu, elektrolytické separace, vnitřní elektrolýza. 6. Coulometrie. Princip metody, srovnání coulometrie a elektrogravimetrie, Faradayovy zákony, elektrochemický ekvivalent, rozdělení coulometrických metod podle pracovního režimu, stanovení počtu přenesených elektronů, metoda určení tloušťky galvanických povlaků. Coulometrická titrace. 7. Polarografie a voltametrie. Klasická polarografie a voltametrie, princip, rtuťová kapající elektroda, nádobky, polarografy, anodicko-katodické zapojení, vyhodnocení

polarografických křivek, polarografické proudy (difúzní, kapacitní, kinetický, katalytický, adsorpční), proudová maxima, rovnice reverzibilní katodické vlny a logaritmická analýza, derivační polarografie, tast-polarografie, střídavá a square wave polarografie a voltametrie. Pulzní metody, princip normální (NPP) a diferenčně pulzní (DPP) polarografie a voltametrie. 8. Cyklická voltamperometrie. Anodická, katodická a adsorptivní rozpouštěcí voltamperometrie. Proces reverzibilní (Randles-Ševčíkova rovnice) a ireverzibilní (Delahayova rovnice). Chronopotenciometrie a chronoampérometrie. 9. Hydrodynamické a mikroelektrody. Studium kinetiky chemických reakcí. Elektrochemická katalýza. Mechanismus elektroodových procesů. Elektrická dvojvrstva a její vliv na rychlost reakce na nabitém fázovém rozhraní. Modely elektrické dvojvrstvy. 10. Konduktometrie a dielektrimetrie. Základní pojmy (absolutní rychlost pohybu iontu, elektrolytická pohyblivost, individuální iontová vodivost, molární vodivost elektrolytu, Kohlrauschův zákon). Konduktometrická titrace. Vysokofrekvenční konduktometrie. Dielektrimetrie. Princip metody a její použití. 11. Impedanční metody. Reálná a imaginární hodnota impedance, Nyquist diagram, ekvivalentní obvod elektrochemické nádoby, elektrochemické impedanční spektrum (EIS), vyhodnocení impedančních dat, stanovení heterogenní rychlostní konstanty. 12. Elektroanalýza s použitím moderních elektrochemických metod: elektrochemické mikrováhy (Quartz Crystal Microbalance QCM), skenovací elektrochemická mikroskopie (scanning tunneling microscopy STM, atomic force microscopy - AFM), spektroelektrochemie (UV-vis, IČ, Raman), sonoelektrochemie.

Výukové metody: Přednáška. Kladen důraz na fyzikálně-chemické principy elektroanalytických metod a jejich aplikaci v chemické analýze. Součástí zkoušky je vystoupení studenta s prezentací na jedno z vybraných témat z elektroanalytických metod.

Metody hodnocení: Prezentace, ústní zkouška

Literatura:

- *Analytická příručka. Díl I [Zýka, 1988].* Edited by Jaroslav Zýka. 4. upr. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 678 s. info
- Čermáková, Ludmila - Zýka, Jaroslav. *Analytická chemie méně běžných prvků.* 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1990. 176 s. ISBN 80-7066-050-3. info
- Brett, Christopher M. A. - Brett, Ana Maria Oliviera. *Electroanalysis.* Oxford : Oxford University Press, 1998. 88 s. ISBN 0-19-854816-8. info
- Bard, Allen J. - Faulkner, Larry R. *Electrochemical methods :fundamentals and applications.* 2nd ed. New York : John Wiley & Sons, 2001. xxi, 833 s. ISBN 0-471-04372-9. info
- *Moderní analytické metody.* Edited by Pavel Klouda. 2. uprav. a dopl. vyd. Ostrava : Pavel Klouda, 2003. 132 s. ISBN 80-86369-07-2. info
- Bard, A.J., Stratman, M. *Encyclopedia of Electrochemistry, Instrumentation and Electroanalytical Chemistry, Vol.3, Wiley-VCH,2001*

C7110 Výpočetní technika - aplikace

Vyučující: [RNDr. Marta Farková CSc.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Cílem předmětu je seznámit studenty s možnostmi využití výpočetní techniky ve výuce chemie.

Osnova:

- 1. Seznámení s programem ISIS Draw. 2. Využití programu MS Word ve výuce chemie. 3. Využití programu MS Excel ve výuce chemie. 4. Využití programu MS PowerPoint ve výuce chemie. 5. Seznámení s výukovými programy (zejména s programy k výuce chemie). 6. Použití internetu v chemii a ve výuce chemie.

Výukové metody: Typ výuky: práce na PC

Metody hodnocení: Typ zkoušky: samostatné práce na PC

Literatura:

- Klement, Milan. *Základy práce s PC.* 1. vyd. Olomouc : Univerzita Palackého, 2001. 215 s. ISBN 80-244-0317-X. info

C7410 Struktura a reaktivita

Vyučující: [prof. RNDr. Petr Klán Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Hlavní cíle kurzu jsou porozumění mezi strukturou organických sloučenin a jejich chemickou reaktivitou. Diskutují se způsoby chemické aktivace, průběh chemické reakce a metody studia reakčních mechanismů.

Osnova:

- 1. Základní pojmy. Rozměr, čas, rychlost a energie v chemii. Vazba. Vnitřní parametry struktury a jejich deformace. Fyzikální vlastnosti sloučenin podmíněné polohou a dislokacemi atomových jader a změnami elektronové hustoty. Efekty substituentů. Prostředky k určování struktury. 2. Molekulové orbitály a reaktivita. Konstrukce molekulových orbitalů, Hückelova aproximace, korelační diagramy. 3. Stabilita molekul. Termochemické aditivní výpočty. Konformace acyklických a cyklických uhlovodíků. Vliv heteroatomu na konformační chování. Torzní a stereoelektronové efekty. Hyperkonjugace. Anomerní efekt. 4. Aromaticita. Antiaromaticita. Homoaromaticita. Aromatické ionty a dipóly. Polycyklické aromatické sloučeniny. Aromatický charakter TS pericyklických reakcí. 5. Nekovalentní interakce a solvatace. Chemie v plynné a kapalně fázi. Roztoky. Iontové páry. Hughesův-Ingoldův model. Vodíková vazba. pi-Interakce. Hydrofobní efekt. Molekulární rozpoznávání. 6. Kyseliny a zásady. Acidobazické rovnováhy ve vodném i nevodném prostředí a v plynné fázi. Aciditní funkce. Vliv substituentů na sílu Brønstedových kyselin a zásad. Kinetická kyselost. 7. Popis chemické reaktivity. Tvrdé a měkké kyseliny, báze, nukleofily a elektrofilny (teorie HSAB). Rychlostní konstanty a teorie tranzitního stavu. Aktivace a hnací síla chemických reakcí. Aktivační entalpie a entropie. Kinetika cyklizačních reakcí. Hammondův postulát. Bellův-Evansův-Polanyiho princip. O'Ferralloy-Jencksovy diagramy. Curtinův-Hammettův princip. 8. Termodynamika a kinetika jako prostředky ke studiu mechanismů chemických reakcí. Vztah pro Gibbsovu energii (LFER): Hammettova rovnice. Taftova rovnice. QSAR. Kinetické izotopové efekty. 9. Katalýza. Specifická a obecná acidobazická katalýza. Brønstedova korelace. Termodynamický cyklus. Heterogenní katalýza. Katalýza s přenosem mezi fázemi. 10. Přenos elektronu. Ionizační potenciál, elektronová afinita a charge-transfer (CT) komplexy. Marcusova teorie. Reakce ve vnitřní a vnější sféře. Přenos elektronu v SN2 a SRN1 reakcích. 11. Fotochemie. Excitace elektromagnetickým zářením. Přejchody mezi elektronovými stavy. Zářivé a nezářivé procesy. Přenos energie. Studium mechanismů fotoreakcí. 12. Neklasické aktivace chemických reakcí. Spinová chemie: Efekt magnetického pole (MFE) a magnetický izotopový efekt (MIE). Mikrovlnná chemie. Sonochemie. Mechanochemie. Radiační chemie. Plazmová chemie.

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: 1 závěrečný písemný test + ústní zkouška.

Literatura:

povinná literatura

- E. V. Anslyn, D. A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, Kausalito, California 2005. ISBN 1-891389-9

neurčeno

- O. Exner: Korelační vztahy v organické chemii. SNTL, Praha 1981
- O. Exner: Struktura a fyzikální vlastnosti organických sloučenin. SNTL, Praha 1985.
- I. Fleming: Hraniční orbitály a reakce v organické chemii. SNTL, Praha 1983.
- F. A. Carey, R. J. Sundberg: Advanced Organic Chemistry, 3rd edition, Part A: Structure and Mechanisms. Plenum Press, New York, 1993.

C7415 Struktura a reaktivita - seminář

Vyučující: [prof. RNDr. Petr Klán Ph.D.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Seminář. Na konci tohoto semináře bude student schopen porozumět a prakticky procvičit látku, která se probírá v kurzu C7410 Struktura a reaktivita.

Osnova:

- 1. Základní pojmy. Rozměr, čas, rychlost a energie v chemii. Vazba. Vnitřní parametry struktury a jejich deformace. Fyzikální vlastnosti sloučenin podmíněné polohou a dislokacemi atomových jader. Reaktivní intermediáty. Prostředky k určování struktury. 2. Stabilita molekul. Termochemické aditivní výpočty. Konformace acyklických a cyklických uhlovodíků. Vliv heteroatomu na konformační chování. Fyzikální vlastnosti sloučenin podmíněné elektronovou hustotou a jejími změnami. Torzní a

stereoelektronové efekty. Hyperkonjugace. Anomerní efekt. 3.Aromaticita. Antiaromaticita. Homoaromaticita. Aromatické ionty a dipóly. 4.Nekovalentní interakce a solvatace. Chemie v plynné a kapalně fázi. Roztoky. Iontové páry. Hughesův-Ingoldův model. Vodíková vazba. -Interakce. Hydrofobní efekt. Molekulární rozpoznávání. 5.Přenos protonu. Acidobazické rovnováhy ve vodném i nevodném prostředí a v plynné fázi. Vliv substituentů na sílu Brønstedových kyselin a zásad. HSAB. 6.Chemická kinetika a reaktivita. Teorie tranzitního stavu. Hammondův a Curtinův-Hammettův princip. Aktivace a hnací síla chemických reakcí. Rychlostní konstanty. Nukleofily a elektrofilny 7.Termodynamika a kinetika jako prostředky ke zkoumání mechanismů chemických reakcí. Izotopové efekty. Efekty substituentů. Vztah pro Gibbsovu energii (LFER). Hammettova rovnice. Taftova rovnice. QSAR. Vztah mezi velikostí kruhu a rychlostními konstantami cyklizačních reakcí. 8.Katalýza. Katalýza přechodovými kovy; katalýza heterogenní a s přenosem mezi fázemi. Enzymatická katalýza. 9.Přenos elektronu. Ionizační potenciál, elektronová afinita a charge-transfer komplexy. Marcusova teorie. Reakce ve vnitřní a vnější sféře. Přenos elektronu v SN2 a SRN1 reakcích. 10.Orbitalová symetrie a reaktivita. Pericyklické reakce. Aromaticita tranzitního stavu v pericyklických reakcích. 11.Fotochemie. Excitace elektromagnetickým zářením. Přechody mezi elektronovými stavy. Zářivé a nezářivé procesy. Fotochemie v pevné fázi a na tuhých nosičích. 12.Spinová chemie. Efekt magnetického pole (MFE). Magnetický izotopový efekt (MIE). Chemicky indukovaná dynamická jaderná polarizace (CIDNP). 13.Neklasické aktivace chemických reakcí. Mikrovlnná chemie. Sonochemie. Mechano-chemie. Plazmová chemie. Interakce gama-záření s organickými látkami. Vliv skupenství.

Výukové metody: Cvičení k přednášce

Metody hodnocení: Účast studentů na semináři a vypracování zadaných úkolů.

Literatura:

- E. V. Anslyn, D. A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, Kausalito, California 2005. ISBN 1-891389-9.

C7440 Koordinace a katalýza

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Pazdera CSc.](#)

Rozsah: 1/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět a vysvětlit principy aplikace přechodových kovů a jejich komplexů v syntéze organických látek.

Osnova:

- Molekulové orbitály komplexů přechodových kovů (schopnost tvorby vazeb, typy ligandů, pí-donorní, pí-akceptorní, d-pí- akceptorní ligandy). Aktivní částice a katalytický cyklus (variabilita oxidačního stupně a koordinačního čísla, pravidlo 18 elektronů; vznik aktivních částic-aktivace cestou adice, koordinace; elementární děje-migrace ligandů, insertní reakce, alfa-,beta-eliminace a příbuzné reakce). Vznik jednoduchých a násobných vazeb mezi uhlíkovými atomy (dimerizace alkenů, zkřížen kopulace, syntéza alkinů, allylová alkylace s využitím paladiových komplexů, dimerizace, oligomerizace a telomerizace dienů, syntéza s využitím sigma- a pí-arenových a pí-cyklohexandienylových komplexů, methatesis allenů). Syntéza karbocyklů (tříčlenných s využitím karbenových intermediátů, čtyřčlenných [2+2]-cykloadice alkenů, pětičlenných cyklooligomerizace butadienů, modifikovaná Diels-Alderova reakce, [3+2]-cykloadice, šesti a více členných cykloadičními, cyklooligomerizačními reakcemi s využitím alkenů, alkadienů a polyenů, acetylenů). Syntéza heterocyklů. Izomerizace alkenů (Alfa-,Beta-nenasycené sloučeniny, konjugované dieny, migrace dvojných vazeb, aromáty). Přímé zavedení karbonylu (syntéza karboxylových kyselin, esterů aj. funkčních derivátů, aldehydů, ketonů, izokyanátů). Redoxní reakce (hydrogenace a redukce násobných vazeb C-C, C-N, N-O, C-O, asymetrická hydrogenace, hydrogenolýza ap.), oxidace alkanů, alkenů (acetoxidace, epoxidace, dehydrogenace ap.).

Výukové metody: Teoretická příprava

Metody hodnocení: Přednáška, ústní zkouška.

Literatura:

- Nakamura, A.; Tsutsui, M. Principles and Applications of Homogeneous Catalysis, J. Wiley New York 1980
- Colquhoun, H. M.; Holton, J.; Thompson, D. J.; Twigg, M. V. New Pathways for Organic Synthesis, Plenum Press, New York 1981, 400 str., ISBN 5-7245-0357-3

- Masters, Ch. Homogeneous Transition-Metal Catalysis, Chapman and Hall, New York 1981
- Petrovič, P.; Haber, V.; Toma, Š. Základy koordinačnej chémie, Univerzita Komenského Bratislava 1983

C7460 Identifikace organických látek - cvičení

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Pazdera CSc.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. Ukončení: z.

Cíle předmětu: Hlavní cíle kurzu jsou: porozumění základům identifikace organických látek na základě komplexu UV-VIS, H-NMR, C-NMR, MS, FTIR spektrálních dat.

Osnova:

- Jaké informace můžeme vyčíst z UV-VIS, IR, NMR a MS spektra. Struktura a její odraz ve spektru. Analýza spekter, zhodnocení získaných informací, předpověď pravděpodobné struktury neznámé látky, zpětné porovnání předpovězené struktury a spektrálních dat. Simulace protonových a uhlíkových spekter na PC, seznámení se software, jeho možnostmi a omezením.

Výukové metody: Seminář.

Metody hodnocení: Seminář-cvičení

Literatura:

- V. Milata, P. Segla, Vybrané metody molekulové spektroskopie, (Selected methods of molecular spectroscopy), STU Bratislava, 2007, ISBN 978-80-227-2618-4
- Friebolin, H. Ein- und zweidimensionale NMR-Spektroskopie, VCh Weinheim 1988, ISBN 3-527-26778-6, 317 p.

C7670 Izotopové metody

Vyučující: [Mgr. Jiří Křivohlávek](#)

Rozsah: 1/0/0. 1 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: zk.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: pochopit a umět vysvětlit základní informace o atomovém jádře, radioaktivním rozpadu, absorpci a detekci ionizujícího záření, izotopových efektech; použít získané informace pro využití radionuklidů v biologii a medicíně.

Osnova:

1. Základní údaje.
2. Atomové jádro.
3. Radioaktivní přeměny a jejich rychlost.
4. Vlastnosti ionizujícího záření.
5. Metody detekce ionizujícího záření.
6. Biologické účinky ionizujícího záření.
7. Použití radionuklidů, izotopů a ionizujícího záření v biologii a lékařství.

Výukové metody: Přednáška a diskuze

Metody hodnocení: Výuka formou přednášky. Ústní případně písemná zkouška. Vzhledem k vysoce odbornému zaměření je doporučeno pravidelně navštěvovat výuku.

Literatura:

doporučená literatura

- Hála, Jiří. *Radioaktivita, ionizující záření, jaderná energie*. První vydání. Nakladatelství Konvoj, spol. s.r.o. : Brno, 1998. 311 s. ISBN 80-85615-56-8. info
- Hála, Jiří. *Cvičení z jaderné chemie*. 3. přeprac. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 1997. 97 s. ISBN 80-210-1636-1. info
- Hála, Jiří. *Izotopy v biologii*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1976. 280 s. info

C7680 Izotopové metody - laboratorní cvičení

Vyučující: [Mgr. Jiří Křivohlávek](#)

Rozsah: 0/2/0. 3 kr. Doporučené ukončení: kz. Jiná možná ukončení: z.

Cíle předmětu: Na konci kurzu bude student schopen: používat přístroje pro detekci a měření ionizujícího záření; pracovat se zdroji ionizujícího záření; separovat a studovat vlastnosti vybraných radionuklidů; orientovat

se v základních zákonných normách, které se týkají práce se zdroji ionizujícího záření a v principech radiační ochrany.

Osnova:

- 1. Bezpečnost práce a principy radiační ochrany.
- 2. Chyby při měření radioaktivních vzorků.
- 3. Mrtvá doba scintilační sondy.
- 4. Charakteristika scintilační sondy.
- 5. Spektroskopie gama záření s krystalovým detektorem.
- 6. Absorpce záření gama a beta.
- 7. Samoabsorpce záření beta.
- 8. Určení poločasu přeměny krátkodobého radionuklidu.
- 9. Určení poločasu přeměny dlouhodobého radionuklidu.
- 10. Určení stupně obohacení uranových preparátů.
- 11. Radioaktivní rovnováha.
- 12. Stanovení objemové aktivity radonu.
- 13. Spektroskopie záření alfa.
- 14. Měření nízkonoenergetického záření beta metodou kapalné scintilace.

Výukové metody: Laboratorní cvičení

Metody hodnocení: Výuka formou praktických laboratorních úloh včetně zpracování protokolů. Nutná 100% účast na výuce. Výuka končí klasifikovaným zápočtem.

Literatura:

- Hála, Jiří. *Cvičení z jaderné chemie*. 3. přeprac. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 1997. 97 s. ISBN 80-210-1636-1. info

C7700 Chemie nekovů

Vyučující: [RNDr. Miloš Černík CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: V této přednášce je prezentována systematická anorganická chemie nekovových prvků hlavních podskupin, jež je zaměřena zejména na sloučeniny vodíku, dusíku, kyslíku a halogenů. Systematicky jsou sledovány jak periodicitu fyzikálních a chemických vlastností prvků a jejich sloučenin, tak i vztahy mezi jejich strukturou a chemickou reaktivitou. Zvýšená pozornost je věnována fullerénům a dalším klastrům nekovových prvků, chemii Zintlových iontů, superkyselinám, homopolyatomickým kationtům a aniontům a některým důležitým anorganickým heterocyklům. Na konci přednášky by tak studenti měli získat vyvážený přehled vybraných důležitých témat z chemie nekovů, jež jsou uvedena v souvislosti s odpovídajícími teoretickými základy a zahrnují rovněž nejnovější výsledky výzkumu. Měli by být schopni si osvojit základní pojmy anorganické chemie a porozumět periodickým trendům v chemické reaktivitě a vazbě ve sloučeninách nekovů.

Osnova:

- 1. Obecná charakteristika prvků hlavních podskupin a jejich vazebné možnosti. Periodické trendy v chemických vlastnostech p-prvků. 2. Mono- a polynuklidické prvky. Stabilní izotopy a fyzikální metody pro stanovení molekulové struktury. 3. Nekovové prvky a jejich krystalová a molekulová struktura. Vazba v homonukleárních dvouatomových molekulách. Spinové izomery; ortho- a para-vodík. Singletové a tripletové stavy molekuly kyslíku. 4. Allotropie prvků a její význam v chemii. Chemie ozonové vrstvy Země. Allotropie chalkogenů, prvků 15. skupiny a boru. 5. Kyseliny a baze - vývoj konceptu. Čisté kyseliny a jejich relativní acidita; superkyseliny. Tvrdé a měkké kyseliny a baze. 6. Homopolyatomické kationty a anionty nepřechodných prvků. Polyhalogenové kationty v superacidních prostředích. Polyjodidy a jiné polyhalogenidové anionty. 7. Soli dioxygenylu; iontové peroxidy, superoxidy a ozonidy. Kovalentní peroxosloučeniny. Kationty a anionty chalkogenů a prvků 15. skupiny. Anionty prvků 14. skupiny a boridy. Struktura a chemie Zintlových fází. 8. Hydridy - vazba v binárních hydridech, jejich struktura a fyzikální vlastnosti, metody přípravy. Chemie kovalentních hydridů nekovů. 9. Halogenidy - příprava, struktura a chemické vlastnosti binárních a smíšených halogenidů nekovů. Interhalogenové sloučeniny; polyhaloniové kationty. 10. Oxidy - obecné metody přípravy, struktura a chemické vlastnosti oxidů nekovových prvků. Kationty odvozené od oxidů dusíku a halogenů. 11. Chemie vybraných oxokyselin nepřechodných prvků a jejich solí. Chemie halogenooxokyselin a halogenid-oxidů nekovů. Fluoridy-oxidy halogenů a příbuzné sloučeniny. 12. Sulfidy, selenidy a telluridy prvků hlavních podskupin. Struktura a chemie sulfidů a selenidů fosforu a

podobných sloučenin. Sulfidy arsenu, antimonu a bismutu. Chemie thiokyselin, jejich solí a dalších derivátů. 13. Přehled binárních nitridů. Acyklické sloučeniny s vazbou fosfor-dusík. Kationty a anionty sirodusíkových sloučenin. Cyklofosfazen a cyklothiazeny.

Výukové metody: Výuka formou přednášky

Metody hodnocení: Ústní zkouška nebo kolokvium.

Literatura:

- Greenwood, N. N. - Earnshaw, Alan. *Chemistry of the elements*. 2nd ed. Oxford : Butterworth-Heinemann, 1997. xxii, 1341. ISBN 0-7506-3365-4. info
- Greenwood, N. N. - Earnshaw, A. *Chemistry of the elements (Orig.) : Chemie prvků. Sv. 1 : Chemie prvků. Sv. 2*. info
- 2. Klapötke T. M., Tornieporth-Oetting I. C.: *Nichtmetallchemie*, VCH, Weinheim 1994.
- Norman N. C.: *Periodicity and the p-Block Elements*, Oxford Univ. Press, Oxford 1994
- 4. Holleman A.F., Wiberg E.: *Lehrbuch der Anorganischen Chemie*, 101. verbesserte und stark erweiterte Auflage von N.Wiberg, Walter de Gruyter, Berlin - New York 1995.
- Cotton, Frank Albert., Murillo C., Wilkinson G., Bochmann M., Grimes R.: *Advanced Inorganic Chemistry*, 6th Ed., : John Wiley & Sons, New York 1999.

C7777 Zacházení s chemickými látkami

Vyučující: [prof. RNDr. Jiří Příhoda CSc.](#)

Rozsah: 0/0/0. 2 hodiny školení autorizovanou osobou. 0 kr. Ukončení: z.

Cíle předmětu: Kurs C7777 Zacházení s chemickými látkami je povinný pro všechny studenty, kteří s nimi během studia na PřF MU pracují. Tato skutečnost je dána studijními plány, za což odpovídají garanti jednotlivých studijních oborů. Cílem je seznámit studenty s platnou chemickou legislativou, pravidly pro zacházení s chemickými látkami a likvidací chemických odpadů.

Osnova:

- Informace o působnosti: zákona 356/2003 Sb. a zákona 352/1999 Sb., nařízení vlády č. 25/1999 a 258/2001, vyhlášky 27/1999 Sb., a zákona 258/2000 Sb. o ochraně veřejného zdraví, které se týkají bezpečnosti při zacházení s chemickými látkami. Probíraná témata: základní pojmy charakteristika nebezpečných látek výstražné symboly, R-věty, S-věty bezpečnostní list balení a označování nebezpečných látek skladování nebezpečných látek zabezpečení nebezpečných látek odpovědnost pracovníků všeobecné zásady práce v chemické laboratoři likvidace odpadů vzniklých při práci s nebezpečnými látkami likvidace zbytků nebezpečných chemických látek ukládání chemických látek chemické databáze a odkazy na informační zdroje

Výukové metody: Úvodní přednáška a samostatná teoretická příprava dle materiálů na webu

Metody hodnocení: Dvouhodinová přednáška na počátku podzimního semestru. Povinná pro studenty 1. ročníku studia, pro ostatní ročníky a doktorandy je fakultativní. Zápočet se získá na základě každoročního absolvování testu (platí pro všechny zapsané studenty).

Literatura:

- Adámková, Marie. *Praktická příručka pro nakládání s chemickými látkami a přípravky včetně nebezpečných*. Praha : Dashöfer, 1999. 1 sv. (rů. ISBN 80-86229-08-4. info
- <http://www.rect.muni.cz/nso/>

C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I

Vyučující: [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#), [RNDr. Petr Kulhánek PhD.](#)

Rozsah: 1/0/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučené ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Kurs je zaměřen na získání základních znalostí v oblasti výpočetní chemie. Jeho orientace je výrazně aplikační. Student získá přehled o reprezentaci molekul v počítači a o tom, jaké údaje zadat počítačovým programům, aby výsledky modelování byly realistické. V závěru se studenti seznámí s některým uživatelsky příjemným programovým balíkem pro počítačové modelování molekul a molekulárních systémů.

Osnova:

- 1. Experiment versus molekulové modelování (úvod do molekulového modelování, validace a predikce, přehled experimentálních metod s jednomolekulárním rozlišením)

- 2. Kvantová mechanika (stručný úvod, Bornova-Oppenheimerova aproximace, koncept hyperploch potenciální energie, stručný přehled metod a programů)
- 3. Hyperplochy potenciální energie (význam, optimalizační metody, hledání lokálních a globálních minim a tranzitních stavů, výpočet termodynamických veličin)
- 4. Molekulová mechanika (sílová pole, dalekodosahové interakce, modelování rozpouštědel, periodické okrajové podmínky, přehled silových polí)
- 5. Molekulová dynamika (vývoj systému v čase, pohybové rovnice, kontrola teploty a tlaku, vlastnosti systému, stručný přehled programů pro molekulovou dynamiku)
- 6. Speciální metody (Monte Carlo simulace, hrubozrné modely)

Výukové metody: přednáška, diskuze

Metody hodnocení: Kurz je zakončen písemným testem, který je následován ústní zkouškou.

Literatura:

- Remko, M. *Molekulové modelovanie. Princípy a aplikácie*. Bratislava : Slovak Academic Press, 2000. info
- Jensen, Frank. *Introduction to Computational Chemistry*. New York : J. Wiley & Sons Ltd., 1999. info
- Lipkowitz, K B - Boyd, D B. *Reviews in Computational Chemistry 1-9*. New York : VCH Publishers, 1998. info
- Hehre, Warren J. - Shusterman, Alan J. - Huang, W. Wayne. *A laboratory book of computational organic chemistry*. Irvine, Calif. : Wavefunction, 1996. xiv, 291 s. ISBN 0-9643495-5-8. info
- Foresman, J B - Frisch, A. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. Pittsburgh : Gaussian, Inc., 1996. info

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Vyučující: [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#), [RNDr. Petr Kulhánek Ph.D.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Ve cvičení se studenti seznámí s některými uživatelsky příjemnými programovými balíky pro počítačové modelování molekul a molekulárních systémů.

Osnova:

- 1. Seznámení s programem Spartan - <http://www.wavefun.com/> (stavba molekul, typy výpočtů, analýza výsledků)
- 2. Seznámení s programem Gaussian - <http://www.gaussian.com/> (příprava vstupních dat, analýza výsledků a jejich vizualizace - Molden, Molekel, VMD)
- 3. Seznámení s programovým balíkem Amber - <http://ambermd.org/> (příprava studovaného systému, ekvilibrace, dynamika, analýza výsledků a jejich vizualizace - VMD)
- 4. Vypracování samostatného projektu

Výukové metody: praktické cvičení

Metody hodnocení: Zápočet je udělen za dokončení projektu a jeho obhájení. Účast je povinná (povolené jsou dvě dopředu omluvené absence).

Literatura:

- Lipkowitz, K B - Boyd, D B. *Reviews in Computational Chemistry 1-9*. New York : VCH Publishers, 1998. info
- Remko, Milan. *Molekulové modelovanie : princípy a aplikácie*. Bratislava : Slovak Academic Press, 2000. 239 s. ISBN 80-88908-62-0. info
- *Introduction to computational chemistry*. Edited by Frank Jensen. 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 2007. xx, 599 s. ISBN 0470011874. info

C7895 Hmotnostní spektrometrie biomolekul

Vyučující: [doc. Mgr. Jan Preisler Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Student získá základy hmotnostní spektrometrie: ionizační metody, hmotnostní analyzátoary, iontové detektory. Důraz bude kladen na porozumění hmotnostní spektrometrii biologických látek (ionizační metody MALDI, ESI) a moderní instrumentaci v hmotnostní spektrometrii (TOFMS, iontové pasti, FTMS).

Osnova:

- 1. Stručná historie hmotnostní spektrometrie: Přehled metod a instrumentace. Základní koncepty MS (rozlišení, citlivost). 2. Ionizační metody a metody zavádění vzorku: Ionizace elektronovým nárazem (EI). Chemická ionizace (CI). Doutnavý výboj. Indukčně vázané plazma (ICP). Ionizace rychlými atomy (FAB). Ionizace (SIMS). Thermospray (TSI). Elektrospray (ESI). Laserová Desorpce (LD). Plazmová Desorpce (PD). Laserová desorpce za účasti matrice (MALDI). Spojení separace a hmotnostní spektrometrie (on-line, off-line, čipy). 3. Hmotnostní spektrometry: Základy iontové optiky. Simulace pohybu iontů (Simion). Energetické analyzátoři. Magnetický sektor. Quadrupólový analyzátor. Iontový cyklotron (FT-ICR-MS). Iontová past (IT). Lineární past (LT). Orbitrap. Time-of-Flight hmotnostní spektrometr (TOFMS). Kolizně indukovaná disociace (CID). Tandemová MS (MS/MS). Principy vakuové techniky. Detektory a detekční elektronika. 4. Aplikace MS: Proteiny a peptidy. Mapování peptidů, proteinové databáze. DNA. Sacharidy. Syntetické polymery.

Výukové metody: Přednášky a závěrečná diskuse.

Metody hodnocení: Závěrečná ústní zkouška (česky nebo anglicky)

Literatura:

- Cotter, Robert J. *Time-of-Flight Mass Spectrometry: Instrumentation and applications in biological research*. Washington, D.C. : American Chemical Society, 1997. 326 s. ISBN 0-8412-3474-4. info
- Cole, Richard B. *Electrospray Ionization Mass Spectrometry: Fundamentals, Instrumentation & Applications*. : John Wiley & Sons, Inc., 1997. 577 s. ISBN 0-471-14564-5. info

C7995 Advanced Methods of Biomolecular NMR

Vyučující: [doc. RNDr. Radovan Fiala CSc.](#), [doc. Mgr. Lukáš Židek Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: The students will get hands-on knowledge of sophisticated experiments used in modern NMR spectroscopy with an accent on techniques for spectroscopy of proteins and nucleic acids. All important experimental issues from sample preparation and spectrometer setup and calibration through data acquisition and processing up to spectra evaluation will be discussed as well as practically performed in the laboratory. At the end of the course, the students will be able to prepare independently a biomolecular sample for NMR spectroscopy, choose the appropriate experiments, set up the measurements, and process and evaluate the data.

Osnova:

- 1. NMR sample, preparation and handling 2. Spectrometer setup 3. Spectrometer calibrations 4. Building blocks of pulse sequences 5. Programming of pulse sequences 6. Water suppression techniques 7. Homonuclear 2D experiments 8. Heteronuclear double and triple resonance experiments 9. 3D experiments for proteins and nucleic acids (HNCO, HNCa, HCCH-TOCSY, HCN) 10. Data processing 11. Analysis of protein NMR spectra 12. Analysis of NMR spectra of nucleic acids

Výukové metody: Lectures, laboratory practice, work on a project

Metody hodnocení: Presence at the practical sessions in the NMR laboratory is required. Final examination will be based on the results of individual student projects.

Literatura:

- *NMR of macromolecules : a practical approach*. Edited by Gordon C.K. Roberts. Oxford : Oxford University Press, 1993. 399 s. ISBN 0-19-963224-3. info
- *Protein NMR spectroscopy : principles and practice*. Edited by John Cavanagh. 2nd ed. Amsterdam : Elsevier, 2007. xxv, 885 s. ISBN 978-0-12-164491. info
- Berger, Stefan - Braun, Siegmund. *200 and more NMR experiments : a practical course*. Weinheim : Wiley-VCH, 2004. xv, 838 s. ISBN 3-527-31067-3. info
- Cavanagh, John - Fairbrother, Wayne J. *Protein NMR Spectroscopy. Principles and Practice*. San Diego : Academic Press, 1996. 587 s. ISBN 0-12-164490-1. info

C7999 Advanced Methods of NMR Spectroscopy

Vyučující:

Rozsah: 0/0/2. 2 kr. (plus 1 za zk). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Advanced methods of 1D and 2D NMR spectroscopy of small molecules. The course is focused on hands-on experience of modern techniques in small molecule NMR spectroscopy.

Osnova:

- **1. Basic 1D NMR spectra:** pulse sequence, acquisition parameters, pulse calibration (direct and indirect), probehead exchange **2. Processing and parameters, temperature measurement** **3. Homonuclear 2D chemical shift correlation experiments:** ^1H - ^1H COSY, ^{31}P - ^{31}P COSY, MQF-COSY, NOESY **4. Heteronuclear 2D chemical shift correlation experiments:** ^{31}P - ^{19}F HETCOR, COLOC **5. Inverse (proton) detection:** HSQC, HMQC, HMBC, pulsed-field gradients **6. Practical aspects for measuring various nuclei:** ^{15}N nucleus (direct and indirect detection), nucleus with spin $> 1/2$ (^{14}N , ^{17}O), ^{29}Si , ^{77}Se , ^{195}Pt **7. Selective and shaped pulses, combined (hybrid) experiments:** selective NOE, HSQC-TOCSY

Výukové metody: Laboratory training and class discussion.

Metody hodnocení: Presence in practical sessions in NMR laboratory is required. Final examination will be based on the structural analysis of unknown sample by using 2D NMR techniques.

Literatura:

doporučená literatura

- Claridge, Timothy D.W. High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Amsterdam, Pergamon, 1999, ISBN 0-08-042798-7
- Braun, S. - Kalinowski, H.O. - Berger, S. 100 and More Basic NMR Experiments, Weinheim, VCH, 1996, ISBN 3-527-29091-5

C8000 Oborový seminář II

Vyučující: [doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.](#)

Rozsah: 0/2/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Zprávy o postupu a prezentace výsledků samostatných projektů, diplomových a disertačních prací. Informace z literatury o nejnovějších výsledcích a vývoji v oboru. Referátové zpracování přehledných článků. Studenti se naučí správně interpretovat vědecké poznatky z literatury a prezentovat výsledky vlastní výzkumné práce.

Osnova:

- Příspěvky studentů, vyučujících a externistů.

Výukové metody: Diskuse, četba, prezentace, skupinové projekty, domácí úlohy atd.

Metody hodnocení: Zápočet je udělen za účast na semináři a aktivní vystoupení studenta.

Literatura:

- Odborná literatura podle zaměření semináře.
- *Angewandte Chemie International Edition*. 2009. ISSN 1433-7851. info
- Current journals specified by the lecturers
- *Journal of the American Chemical Society*. 2009. ISSN 0002-7863. info

C8001 Diplomová práce II

Vyučující: vedoucí práce

Rozsah: 0/0/5. 5 kr. Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Předmět diplomová práce je koncipován jako kurz motivující studenta ke zpracování výsledků vlastního výzkumu ve formě diplomové práce splňující veškeré požadavky na ni kladené. Absolvování tohoto kurzu a kurzů navazujících zajistí, že student odevzdá diplomovou práci odsouhlasenou vedoucím. Navíc student hlouběji porozumí výzkumným metodám používaným v dané oblasti, bude schopen samostatné výzkumné činnosti a bude si uvědomovat etické aspekty vědecké práce.

Osnova:

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

Výukové metody: Vlastní řešeršní činnost, výzkumná práce v laboratoři, konzultace s vedoucím.

Metody hodnocení: Zápočet je udělený za úspěšný postup v přípravě práce.

Literatura:

- Eco, Umberto - Seidl, Ivan. *Jak napsat diplomovou práci*. Olomouc : Votobia, 1997. 271 s. ISBN 80-7198-173-7. info

- Literatura dle doporučení vedoucího diplomové práce (Literature according to the recommendation of the thesis supervisor)

C8102 Speciální metody - laboratorní cvičení

Vyučující: [RNDr. Marta Farková CSc.](#), [Mgr. Aleš Hrdlička Ph.D.](#), [doc. RNDr. Přemysl Lubal Ph.D.](#)

Rozsah: 0/0/5. 5 kr. (plus ukončení). Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Hlavním cílem kurzu je osvojení si praktických dovedností v metodách optické spektroskopie, hmotnostní spektroskopie, elektroanalytických metodách a separačních analytických metodách. a) Molekulová fluorescence, UV/Vis spektrofotometrie, atomová emisní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem (ICP-AES), spektrometrie s využitím laseru (LA-ICP-OES a LIBS), jiskrová spektrometrie. b) Moderní elektroanalytické metody, eliminační voltametrie, rozpouštěcí voltametrie, potenciometrie, dielektrimetrie. c) Kapalinová chromatografie HPLC, izotachofóreza, plynová chromatografie, kapilární zónová elektroforéza, hmotnostní spektrometrie s průletovým analyzátozem a laserovou desorpčí/ionizací typu "matrix assisted" (MALDI-TOF-MS).

Osnova:

- A) Úvod do laboratorního cvičení, klasifikované testy: spektroskopie, elektroanalytické metody, separační metody. B) BLOK ELEKTROANALYTICKÉ METODY: 1. Stanovení dipólového momentu cyklohexanonu a/nebo cyklohexanolu (měření kapacity a permitivity kapalných dielektrik, polarizace dielektrika, Hedestrandova metoda, výpočet DM pomocí semiempirických metod, srovnání teoretického a experimentálně zjištěného DM). 2. Určení počtu vyměňovaných elektronů při redukci azidového derivátu v závislosti na pH (coulometrie s využitím ISESu jako on line jednotky pro sledování časové závislosti proudu spolu s integrací, sledování mechanismu elektrodové redukce a ohledem na pufrované a nepufrované prostředí) 3. Stanovení koncentrace chloridů ve vzorcích mléčných výrobků (potenciometrická titrace, srovnání metody kalibrační křivky a metodou standardního přídatku, výhody a nevýhody těchto dvou přístupů) 4. Analýza krmné soli na těžké kovy (pomocí anodického strippingu v kombinaci s diferenční pulzní voltametří jsou v krmné soli pro lesní zvířata sledovány těžké kovy, jako Cd, Pb, Cu a Zn koncentrace v jednotkách ppm) 5. Analytické využití nové elektrochemické metody eliminační voltametrie (na rtuťové elektrodě HMDE a na parafinem impregnované uhlíkové elektrodě PIGE jsou sledovány redukce a oxidace vybraných depolarizátorů, výhody EV pro elektroanalýzu, srovnání procesů na kapalných a pevných elektrodě, určení řídicího kroku v elektrodovém procesu - tzv. rate determining step pomocí vybraných eliminačních funkcí) 6. Stanovení aniontů ve vodách s využitím automatického titrátoru a přístroje EcaFlow C) BLOK SPEKTRÁLNÍ METODY 7. Analýza archeologických materiálů (kosti) optickou emisní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem. Vypracování metody pro ICP spektrometr Jobin-Yvon 170 Ultrace: výběr analytických čar, volba bodů pro korekci pozadí, kalibrační závislost, analýza reálných vzorků. 8. Diagnostika ICP - stanovení excitační teploty v ICP výboji z Boltzmannova zákona s použitím emisních intenzit čar železa a metodou 2 čar. Výpočet průměrné koncentrace elektronů v ICP výboji ze Starkova rozšíření čáry H 486,1 nm. 9. Molekulová fluorescenční spektroskopie - Fluorescenční stanovení chininu a riboflavinu. Určení emisních a excitačních maxim chininu a riboflavinu v roztoku, kalibrační křivka, stanovení obsahu riboflavinu (v tabletách) a chinin (v toniku) v reálných vzorcích 10. UV/VIS molekulová spektroskopie. Vícesložková spektroskopická a kinetická analýza (Stanovení dichromanu a manganistanu ve směsi; Stanovení molybdenanu a wolframanu ve směsi, stanovení Fe(II) a Fe(III) ve směsi, stanovení Co(II) a Cr(III) ve směsi) 11. Analýza vzorků ocelí pomocí laserové ablace spojené s optickou spektrometrií indukčně vázaného plazmatu. Optimalizace parametrů laserové ablace. Naměření kalibrační závislosti a analýza reálných vzorků ocelí a půdních lisovaných tablet. 12. Analýza vzorků ocelí pomocí jiskrové spektrometrie. Zjištění interferencí měřených emisních čar. Kalibrace a analýza reálných vzorků ocelí. 13. Využití spektrometrie laserem buzeného plazmatu (LIBS) v analýze vzorků ocelí. Optimalizace parametrů laseru (zaostření laserového paprsku a energie pulzu laseru). Kalibrační závislosti a analýza reálných vzorků ocelí a půdních lisovaných tablet. D) BLOK SEPARAČNÍ METODY 14. Kapalinová chromatografie. HPLC - Stanovení obsahu inosinu, adenosinu a jejich 2'-deoxy-forem v modelové směsi – optimalizace a validace metody. 15. Stanovení aniontů ve vodách metodou ITP. 16. CE-LIF, kapilární zónová elektroforéza s laserem indukovanou fluorescenční detekcí. Optimalizace experimentální sestavy. Stanovení meze detekce rhodaminu 6G. Separace rhodaminových barviv a značených biologických peptidů. 17. MALDI TOF MS, laserová desorpce a ionizace za účasti matrice ve spojení s průletovým analyzátozem. Kalibrace přístroje a stanovení molekulových hmotností vybraných analytů. Porovnání TOF analýzy peptidů a proteinů v lineárním modu a s reflektorem. Peptidové mapování, identifikace neznámého proteinu.

Výukové metody: laboratorní cvičení

Metody hodnocení: Laboratorní cvičení probíhá ve třech uzavřených cyklech: optické metody, elektroanalytické metody, separační metody (+MALDI-MSTOF). Úlohy se zpravidla provádějí po individuální domluvě s vyučujícím. Klasifikovaný zápočet je udělen po absolvování všech úloh a odevzdání protokolu a jeho odsouhlasení vyučujícím, který danou úlohu vede.

Literatura:

- Bartušek, Miloš. *Úvod do elektroanalytických metod*. 1. vyd. Praha : SPN, 1984. 104 s. : i. info
- *Analytická příručka. Díl I [Zýka, 1988]*. Edited by Jaroslav Zýka. 4. upr. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 678 s. info
- Churáček, Jaroslav. *Nové trendy v teorii a instrumentaci vybraných analytických metod*. Vyd. 1. Praha : Academia, 1993. 387 s. ISBN 80-200-0010-0. info
- Sommer, Lumír. *Teorie a praxe vybraných optických analytických metod*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1978. 285 s. info
- Vysoká škola chemicko-technologická (Pardubice). Katedra analyti. *Pokroky v teorii a instrumentaci moderních analytických metod*. Edited by Jaroslav Churáček. 2. přeprac. a dopl. vyd. Pardubice : Vysoká škola chemicko-technologická, 1988. 193 s. info
- *Nové směry v analytické chemii. Svazek II*. Edited by Jaroslav Zýka. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1984. 218 s. info
- *Analytická příručka. Díl II [Zýka, 1988]*. Edited by Jaroslav Zýka. 4. upr. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 831 s. info
- Sommer, Lumír. *Analytical absorption spectrophotometry in the visible and ultraviolet : the principles*. Amsterdam : Elsevier, 1989. 310 s. ISBN 0-444-98882-38. info
- Churáček, Jaroslav - Jandera, Pavel. *Separace látek : kapalinová vysokoúčinná kolonová chromatografie*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1981. 140 s. info
- Koryta, Jiří. *Současné trendy v elektrochemii*. 1. vyd. Praha : Academia, 1986. 128 s. info
- Dvořák, Jiří - Koryta, Jiří. *Elektrochemie [Dvořák, 1983]*. 3. dopl. a rozš. vyd. Praha : Academia, 1983. 410 s. info
- Holzbecher, Závaš - Churáček, Jaroslav. *Analytická chemie [Holzbecher, 1987]*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1987. 663 s. info
- *Nové směry v analytické chemii. Svazek I*. Edited by Jaroslav Zýka. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1983. 199 s. info
- Churáček, Jaroslav. *Analytická separace látek*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1990. 384 s. ISBN 80-03-00569-8. info
- Kanický, Viktor - Otruba, Vítězslav - Sommer, Lumír - Toman, Jiří. *Optická emisní spektrometrie v indukčně vázaném plazmatu a vysokoteplotních plamenech*. 1. st. Praha : Academia, 1992. 152 s. Pokroky chemie 24. ISBN 80-200-0215-4. info
- Churáček, Jaroslav. *Úvod do vysokoúčinné kapalinové kolonové chromatografie*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1984. 188 s. info
- Sommer, Lumír. *Analytická spektrometrie. I*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1986. 173 s. info

C8500 Mechanismy organických reakcí

Vyučující: [prof. RNDr. Petr Klán Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Kurs Mechanismy organických reakcí navazuje na předešlou přednášku Struktura a reaktivita. Hlavní cílem kurzu je porozumění detailům mechanismů chemických transformací organických sloučenin, které se studují chemickými a fyzikálními metodami.

Osnova:

- 1. Jak správně psát reakční mechanismy. Zápis struktury a elektronových přesunů. 2. Jak studovat reakční mechanismy. Kinetické i nekinetické metody. Identifikace produktů. Křížové pokusy. Izotopické značení. Vliv rozpouštědla. Stereochemie. 3. Reaktivní intermediáty. Radikály, karbeny, nitreny, karbokationty, karbanionty. 4. Elektrofilní adice na násobnou vazbu. Hydratace. Oxymerkurační. Hydroborace. Epoxidace. Adice na alkyne a kumuleny. 5. Nukleofilní adice na karbonyl. Adice nukleofilu. Hydrolýza. Grignardova reakce. 6. Eliminační reakce. Typy eliminačních reakcí a jejich přechodový stav. Stereochemie. Pyrolitické eliminace. 7. Elektrofilní aromatická substituce. Kvantitativní měření SEAr rychlostí. Ipso-substituce. Reaktivita polycyklických aromatických sloučenin. 8. Nukleofilní aromatická a vinylová substituce. S_NAr reakce. Nukleofilní substituce benzynového typu. 9. A-E Reakce na karbonylu. Tautomerizace. Aldolizace. 10. Nukleofilní alifatická substituce. S_N1 a S_N2. Substituce s přenosem elektronu. 11. Izomerizace a přesmyky.

Migrace elektrofilních částic. 12. Reakce radikálů a karbenů. Substituční a adiční reakce. Fragmentace. Přesmyky. Redukce kovy. Reakce s přenosem elektronu. Řetězové reakce. Reakce karbenů. 13. Reakce za účasti přechodných kovů. Typy reakcí. Kovem zprostředkované reakce. Kovem katalyzovaná reakce. 14. Pericyklické reakce. Výběrová pravidla. Cykloadice. Elektrocyklizace. Sigmatropní přesmyky. Ene reakce. 15. Fotochemické reakce. Reaktivita excitovaných stavů. Cykloadice. Fotoindukované odštěpení vodíku. Fotoeliminace. Fotofragmentace. Reakce singletového kyslíku. 16. Jmenné reakce. Aldolová kondenzace; Arndtova-Eistertova reakce; Bartonova reakce; Beckmannův přesmyk; Birchova redukce; Canizzarova reakce; Claisenova reakce; Claisenův přesmyk; Copeho přesmyk; Dielsova-Alderova reakce; Friedelova-Craftsova reakce; Grignardova reakce; Hofmannova eliminace; Hofmannovo odbourávání; Hydroborace; Mannichova reakce; Michaelova adice; Mitsunobuova reakce; Norrishova reakce typu II; Perkinova kondenzace; Sandmayerova reakce; Stilleho reakce; Suzukiho reakce; Swernova oxidace; Wittigova reakce.

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: 1 písemný test + ústní zkouška

Literatura:

- E. V. Anslyn, D. A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, Sausalito, California 2005. ISBN 1-891389-
- A: Jurášek: Fyzikální principy a mechanismy organických reakcí. Veda, Bratislava 1989.
- O. Červinka: Mechanismy organických reakcí. SNTL/ALFA, Praha 1981.

C8510 Mechanismy organických reakcí - seminář

Vyučující: [prof. RNDr. Petr Klán Ph.D.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Na konci tohoto semináře bude student schopen porozumět a prakticky procvičit látku, která se probírá v kurzu C8500 Mechanismy organických reakcí.

Osnova:

- 1. Jak správně psát reakční mechanismy. Zápis struktury a elektronových přesunů. 2. Jak studovat reakční mechanismy. Kinetické i nekinetické metody. Identifikace produktů. Křížové pokusy. Izotopické značení. Vliv rozpouštědla. Stereochemie. 3. Reaktivní intermediáty. Radikály, karbeny, nitreny, karbokationty, karbanionty. 4. Elektrofilní adice na násobnou vazbu. Hydratace. Oxymerkurace. Hydroborace. Epoxidace. Adice na alkyne a kumuleny. 5. Nukleofilní adice na karbonyl. Adice nukleofilu. Hydrolyza. Grignardova reakce. 6. Eliminační reakce. Typy eliminačních reakcí a jejich přechodový stav. Stereochemie. Pyrolitické eliminace. 7. Elektrofilní aromatická substituce. Kvantitativní měření SEAr rychlostí. Ipso-substituce. Reaktivita polycyklických aromatických sloučenin. 8. Nukleofilní aromatická a vinylová substituce. SNAr reakce. Nukleofilní substituce benzynového typu. 9. A-E Reakce na karbonylu. Tautomerizace. Aldolizace. 10. Nukleofilní alifatická substituce. SN1 a SN2. Substituce s přenosem elektronu. 11. Izomerizace a přesmyky. Migrace elektrofilních částic. 12. Reakce radikálů a karbenů. Substituční a adiční reakce. Fragmentace. Přesmyky. Redukce kovy. Reakce s přenosem elektronu. Řetězové reakce. Reakce karbenů. 13. Reakce za účasti přechodných kovů. Typy reakcí. Kovem zprostředkované reakce. Kovem katalyzovaná reakce. 14. Pericyklické reakce. Výběrová pravidla. Cykloadice. Elektrocyklizace. Sigmatropní přesmyky. Ene reakce. 15. Fotochemické reakce. Reaktivita excitovaných stavů. Cykloadice. Fotoindukované odštěpení vodíku. Fotoeliminace. Fotofragmentace. Reakce singletového kyslíku. 16. Jmenné reakce. Aldolová kondenzace; Arndtova-Eistertova reakce; Bartonova reakce; Beckmannův přesmyk; Birchova redukce; Canizzarova reakce; Claisenova reakce; Claisenův přesmyk; Copeho přesmyk; Dielsova-Alderova reakce; Friedelova-Craftsova reakce; Grignardova reakce; Hofmannova eliminace; Hofmannovo odbourávání; Hydroborace; Mannichova reakce; Michaelova adice; Mitsunobuova reakce; Norrishova reakce typu II; Perkinova kondenzace; Sandmayerova reakce; Stilleho reakce; Suzukiho reakce; Swernova oxidace; Wittigova reakce.

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: Účast studentů na semináři a vypracování úkolů.

Literatura:

- E. V. Anslyn, D. A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, Sausalito, California 2005. ISBN 1-891389-9
- A: Jurášek: Fyzikální principy a mechanismy organických reakcí. Veda, Bratislava 1989.

- O. Červinka: Mechanismy organických reakcí. SNTL/ALFA, Praha 1981.

C8700 Technologie chemických výrob

Vyučující: [doc. Ing. Vladimír Šindelář Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (plus ukončení). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: V rámci tohoto předmětu je věnována pozornost základům anorganických a organických výrob technologicky nejdůležitějších sloučenin. Dále pak přehledu jednoduchých technologických výrobních zařízení a aparatur, konstrukčním materiálům a jejich využitelnost při jednotlivých výrobcích a jednoduchým výpočtům na základě materiálové bilance vybraných technologických procesů.

Osnova:

- 1. Technologie odpadních vod, technické plyny, výroba vodíku a oxidu uhličitého. 2. Průmysl síry, výroba kyseliny sírové, sirouhlíku. Průmysl dusíku, výroba kyseliny dusičné, amoniaku a kyanovodíku. Výroba chlorovodíku a kyseliny chlorovodíkové. Výroba kyseliny fosforečné. 3. Výroba sody, výroba průmyslových hnojiv. Elektrotermické výroby, výroba karbidu vápenatého, karbidu křemíku a fosforu. Elektrochemické výroby, výroba hydroxidu sodného. 4. Stavební hmoty a silikáty, maltoviny, cementy, sádra, keramika, porcelán, sklo, výroba elementárního křemíku. 5. Metalurgické výroby - výroba železa a oceli, výroba hliníku, mědi, niklu a olova. Základní informace o výrobě uranu a technologii přepracování vyhořelého jaderného paliva. 6. Paliva, technologie paliv, úpravy paliv a jejich zplyňování. Jaderná energetika a energetické sloučeniny. 7. Zpracování uhlí, karbonizace, zplyňování, zpracování dehtu. Zpracování ropy. 8. Zpracování zemního plynu a jeho chemické využití. Tenzidy a detergenty. 9. Výroba základních alkoholů, ketonů, aldehydů, aromatických uhlovodíků, aminů, halogen derivátů uhlovodíků, etherů a jejich další využití. 10. Chemické zpracování dřeva, celulóza, viskóza, papír, třísloviny, silice, glukóza, lignin. Výroba škrobu. 11. Potravinářská technologie - výroba cukru, čokolády, piva a lihovin. 12. Výroba základních druh polymerů, technologie zpracování plastů.

Výukové metody: Přednáška

Metody hodnocení: zkouška písemná a ústní

Literatura:

- Neiser, Jan. *Obecná chemická technologie*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1981. 286 s. info
- Hovorka, František. *Technologie chemických látek*. Praha : Vydavatelství VŠCHT Praha, 2005. 180 s. ISBN 80-7080-588-9. URL info
- Pichler, Jiří. *Základní chemické výroby : (organická část)*. 1. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 1998. 99 s. ISBN 80-210-1757-0. info
- Neiser, Jan. *Obecná chemická technologie*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1981. 286 s. info
- Meindl, Jiří. *Technologie základních anorganických výrob*. 1. vyd. Brno : Rektorát Masarykovy university, 1989. 143 s. ISBN 80-210-0128-3. info
- Pichler, Jiří. *Technologie základních organických látek, tenzidy, barviva a pigmenty*. 1. vyd. Brno : Univerzita Jana Evangelisty Purkyně, 1987. 81 s. info
- Pichler, Jiří. *Chemie ve společnosti*. 1. vyd. Brno : Rektorát Masarykovy university, 1992. 199 s. ISBN 80-210-0364-2. info
- Pichler, Jiří. *Užitá chemie*. 1. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 1999. 254 s. ISBN 80-210-2016-4. info
- Pichler, Jiří. *Chemická technologie základních organických látek*. Vyd. 1. Brno : Masarykova univerzita, 1992. 102 s. ISBN 80-210-0553-. info
- Mleziva, Josef. *Polymery - výroba, struktura, vlastnosti a použití*. 1. vyd. Praha : Sobotáles, 1993. 525 s. ISBN 80-901570-4-1. info

C8780 Organic Photochemistry

Vyučující: [prof. RNDr. Petr Klán Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (přif plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: The main objective of the course is making students aware of basic photochemistry and photophysics. The course discusses the chemistry that follows the absorption of electromagnetic radiation. It explains the extraordinary influence of visible or ultraviolet light on structural changes and chemical behaviour

of organic compounds. The course covers applied photochemistry; i.e. photochemical applications in the industry, medicine and biology. Common photochemical transformations in nature are also discussed.

Osnova:

- 1. Introduction to photochemistry. History. Calibration points: energetics and dynamics. Excited states and their fates. Jablonski diagram. Photophysical and photochemical processes. Lambert-Beer law. Quantum yield. Electronic configurations. Selection rules. 2. Radiation processes. Absorption. Emission. Frack-Condon law. 3. Radiationless processes. Intersystem crossing. El-Sayed rules. Vibrational relaxation. 4. Mechanistic and experimental photochemistry. Rate constants. Quantum yields. Actinometry. Stern-Volmer dependence. State diagrams. Experimental photochemistry: light sources, photoreactors, flash photolysis. Safety. 5. Electron and energy transfer. Excimers. Exciplexes. Marcus theory. Electron transfer. Energy transfer. 6. Alkenes and alkynes. E-Z isomerization. Electrocyclic and sigmatropic photorearrangement. di-pi-Methane photorearrangement. Photoinduced nucleophile, proton, and electron addition. Photocycloaddition reaction. 7. Aromatic compounds. Photorearrangement. Phototransposition. Photocycloaddition. Photosubstitution. 8. Oxygen compounds. Photoreduction. Oxetane formation (Paternò-Büchi Reaction). Norrish type I and II reactions. Photoenolization. Addition and hydrogen/electron transfer reaction. 9. Nitrogen compounds. E-Z isomerization. Photofragmentation. Photorearrangement. Photoreduction. 10. Sulphur compounds. Hydrogen abstraction. Cycloaddition. Photofragmentation. 11. Halogen compounds. Photohalogenation. Photofragmentation. Photoreduction. Nucleophilic photosubstitution. 12. Molecular oxygen. Ground state and excited state oxygen. Photooxygenation. Ene reaction. 13. Photosensitizers, photoinitiators and photocatalysts. Organic and transition-metal species

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: 1 závěrečný písemný test.

Literatura:

- Klán, Petr - Wirz, Jakob. *Photochemistry of Organic Compounds: From Concepts to Practice*. 1. vyd. Chichester, UK : John Wiley & Sons Ltd., 2009. 584 s. Postgraduate Chemistry Series. ISBN 978-1-4051-9088-6. URL info
- Klán, Petr. *Organická fotochemie*. 1. vydání. Brno : Vydavatelství MU, 2001. 121 s. ISBN 80-210-2526-3. info

C8840 Chemie makrocyclických sloučenin

Vyučující: [doc. RNDr. Přemysl Lubal Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Hlavním úkolem předmětu je porozumět a pochopit reaktivitu a vlastnosti makrocyclických sloučenin. Výklad je doprovázen příklady převzatými jak z literatury, tak z pracoviště přednášejícího. Je také poukázáno na potenciální využití makrocyclických komplexů v praxi.

Osnova:

- 1. Úvod do chemie makrocyclů (nomenklatura, přírodní makrocyclky, význam).
- 2. Typy makrocyclických ligandů a jejich komplexů, cyklické polyaminy a porfyriny, cyklické polyethery (crowny, polyethery, kryptandy, kavitandy, kalixareny), cyklické ligandy s jinými donorovými atomy než O nebo N, polyjaderné a polymerní makrocyclky, katenany a katenandy, makrocyclické cukry, robustní makrocyclky (sepulchuráty), stereoizomerie makrocyclků, "hole-size" koncept.
- 3. Aspekty syntézy makrocyclů. Volné ligandy - netemplátová syntéza, reakce vzniku kruhu (syntéza při vysokém a nízkém zředoování).
- 4. Komplexy - netemplátová syntéza, templátová syntéza (vliv fyzikálních a chemických podmínek na druh a výtěžek reakce - druhy templátových efektů, "in situ" reakce. Derivatizace makrocyclků - zavádění funkčních skupin na cyklický skelet a chránění cyklického skeletu.
- 5. Chelátový a makrocyclický efekt - původ a kvantifikace. Experimentální techniky vhodné pro studium reaktivity makrocyclických sloučenin.
- 6. Termodynamický aspekt - selektivita pro ionty. Kinetický aspekt - formační a disociační kinetika.
- 7. Reaktivita komplexů a jejich redoxní vlastnosti. Stabilizace méně obvyklých oxidačních stavů - "metal-centred", "ligand-centred" oxidace a redukce. Substituční reakce v axiální poloze, reakce koordinovaného makrocyclického ligandu, reakce demetalační a reakce výměny iontů.
- 8. Makrocyclické systémy. Komplexace iontů kovů (cyklické polyethery, polyaminy a polyiminy; kryptandy, kalixareny, aj.).

- 9. "Host-guest" chemie - komplexace organických kationtů.
- 10. Komplexace organických aniontů.
- 11. Komplexace neutrálních látek - cyklodextriny.
- 12. Využití makrocyclických ligandů a jejich komplexů v chemii, biologii, medicíně - příklady.

Výukové metody: teoretická příprava

Metody hodnocení: Přednáška probíhá semestrálně nebo blokově po dohodě s vyučujícím. Znalosti jsou prověřovány formou ústní zkoušky.

Literatura:

- Constable, Edwin C., *Coordination Chemistry of Macrocyclic Compounds*, Oxford University Press, Oxford 1999.
- Martell, Arthur E. - Hancock, Robert D. *Metal complexes in aqueous solutions*. New York : Plenum Press, 1996. x, 253 s. ISBN 0-306-45248-0. info
- Lindoy L.F., *The Chemistry of Macrocyclic Ligand Complexes*, Cambridge University Press, Cambridge 1989.

C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II

Vyučující: [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#), [Mgr. Zdeněk Kříž Ph.D.](#)

Rozsah: 1/0/0. 2 kr. Doporučované ukončení: k. Jiná možná ukončení: zk.

Cíle předmětu: Kurs je zaměřen na získání pokročilých znalostí v oblasti výpočetní chemie. Jeho orientace je výrazně aplikační. Student získá přehled o metodách analýzy komplikovaných energetických prostorů, metodách simulujících dynamiku molekul, metodách umožňujících studovat molekulární komplexy a chemické reakce. V neposlední řadě se student seznámí s různými způsoby, jak do výpočtu zahrnout solvent. V závěru se studenti seznámí s některým uživatelsky příjemným programovým balíkem pro počítačové modelování molekul a molekulárních systémů.

Osnova:

- 1. Hyperplochy potenciální energie (PES). Význam a charakteristika stacionárních bodů. Základní algoritmy pro jejich vyhledávání. 2. Simulace chování molekulárního systému. Molekulová dynamika a metody Monte Carlo. 3. Konformační změny a jejich počítačové studium. Řešení problému mnohonásobných minim v konformační analýze. Energetické bariery konformačních interkonverzí. 4. Úvod do počítačového studia supramolekul, molekulárních komplexů a biomolekul. Dokování molekul. Design nových molekul. 5. Modelování solventu. 6. Modelování chemických reakcí. 7. Programové systémy Insight II, AMBER, DISCOVER, Oxford Molecular, WHATIF, AUTODOCK.

Výukové metody: Přednášky kombinované s diskusí nad projekty.

Metody hodnocení: Kurs sestává ze sedmi dvouhodinových přednášek. Ty jsou přednášeny samotnými frekventanty kursu na základě předběžné domluvy s vyučujícím. Pro ty studenty, kteří si zapsali cvičení, pak následuje samostatný projekt, který má ve většině případů úzký vztah k odbornému zaměření studenta.

Literatura:

- Lipkowitz, K B - Boyd, D B. *Reviews in Computational Chemistry 1-9*. New York : VCH Publishers, 1998.
- Hehre, Warren J. - Shusterman, Alan J. - Huang, W. Wayne. *A laboratory book of computational organic chemistry*. Irvine, Calif. : Wavefunction, 1996. xiv, 291 s. ISBN 0-9643495-5-8. info
- Foresman, J B - Frisch, A. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. Pittsburgh : Gaussian, Inc., 1996. info
- Jensen, Frank. *Introduction to Computational Chemistry*. New York : J. Wiley & Sons Ltd., 1999. info

C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení

Vyučující: [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#), [Mgr. Zdeněk Kříž Ph.D.](#)

Rozsah: 0/1/0. 1 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: z. Jiná možná ukončení: kz.

Cíle předmětu: Samostatný projekt v pokročile výpočetní chemii.

Osnova:

- Student si volí pokročilý samostatný projekt po konzultaci s vyučujícím.

Výukové metody: Práce na projektu.

Metody hodnocení: Diskuse o projektu, protokol

Literatura:

- *Encyclopedia of computational chemistry*. Edited by Paul von Ragué Schleyer. Chichester : John Wiley & sons, 1998. xxix, s. 2. ISBN 0-471-96588-X. info
- Dle potřeb projektu

C8860 Syntetické metody "zelené" chemie

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Pazdera CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Hlavní cíle kurzu jsou seznámení s pojmy: Udržitelný rozvoj a udržitelná chemie (Green Chemistry) - východiska a principy. Katalýza fázovým přenosem (PTC). Principy, PTC katalyzátory, lipofilita iontů. Dvoufázové PTC systémy s-l, l-l, g-l, třífázové PTC systémy. Inverzní PTC. Aplikace v syntéze. Micelární katalýza. Tenzidy a syntéza ve vodném prostředí. Princip, materiály, aplikace. Použití ultrazvuku (US) v syntéze, principy, srovnání s PTC, aparatura. Aplikace. Vliv US na heterogenní (s-l, l-l, g-l) a homogenní reakce. Aktivace heterogenních katalyzátorů (kovů). Mikrovlny a syntéza. Principy, aparatury-metodiky, aplikace. Reakce na tuhých nosičích. Princip, materiály, aplikace. Iontové kapaliny. Iontové kapaliny jako rozpouštědla a katalyzátory, výhody proti klasickým solventům, omezení. Srovnání výsledků aplikace "klasických" postupů s aplikací syntetických metod "zelené" chemie.

Osnova:

- Udržitelný rozvoj a udržitelná chemie (Green Chemistry) - východiska a principy. Katalýza fázovým přenosem (PTC). Principy, PTC katalyzátory, lipofilita iontů. Dvoufázové PTC systémy s-l, l-l, g-l, třífázové PTC systémy. Inverzní PTC. Aplikace v syntéze. Micelární katalýza. Tenzidy a syntéza ve vodném prostředí. Princip, materiály, aplikace. Použití ultrazvuku (US) v syntéze, principy, srovnání s PTC, aparatura. Aplikace. Vliv US na heterogenní (s-l, l-l, g-l) a homogenní reakce. Aktivace heterogenních katalyzátorů (kovů). Mikrovlny a syntéza. Principy, aparatury-metodiky, aplikace. Reakce na tuhých nosičích. Princip, materiály, aplikace. Iontové kapaliny. Iontové kapaliny jako rozpouštědla a katalyzátory, výhody proti klasickým solventům, omezení. Srovnání výsledků aplikace "klasických" postupů s aplikací syntetických metod "zelené" chemie.

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: Přednáška, konzultace, samostudium zadané literatury, ústní zkouška.

Literatura:

- Green chemistry and processes, M. Doble., A.K. Kruthiventi, Elsevier, AP London 2007.
- Green chemistry, an introductory text, M. Lancaster, RSC London 2002.

C8885 Supramolekulární chemie

Vyučující: [doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: Úvod do supramolekulární chemie, který je zaměřen na základní pojmy předmětu. Studenti se seznámí s významnými typy mezimolekulových interakcí a sloučeninami uplatňujícími se při studiu rozpoznávání iontů a neutrálních molekul. Základní principy supramolekulární chemie jsou demonstrovány v oblastech jako reaktivita a katalýza, studium transportních dějů, samoorganizace systémů (self assembly), vytváření supramolekulárních zařízení, studium kapalných krystalů a v neposlední řadě i design molekul žádaných supramolekulárních vlastností.

Osnova:

1. Vymezení předmětu supramolekulární chemie, základní pojmy a principy. Povaha supramolekulárních interakcí. (Iontové interakce, dipolární interakce, vodíková vazba, kation-pí interakce, pí-pí stacking, van der Waalovy síly, Hydrofobní efekt.
2. Rozpoznávání molekul. Rozpoznávání a selektivita. Termodynamická a kinetická selektivita. Molekulární receptory. Chelátový a makrocyclický efekt. Preorganizace a komplementarita. Základní typy rozpoznávání, kationty, anionty, neutrální molekuly.
3. Rozpoznávání kationtů. Crown ethery. Cryptandy. Sferandy. Selektivita komplexace kationtů. Komplexace organických kationtů, vazba amoniového kationtu.

- 4. Calix[n]areny. Struktura a konformace kalixarenů, jednoduché chemické transformace kalixarenů. Komplexace kationtů, aniontů a neutrálních molekul kalixareny.
- 5. Rozpoznávání aniontů. Biologické receptory aniontů. Rozpoznávání aniontu a kationtu v závislosti na pH. Guadiniové, organometalické a neutrální receptory. Komplexace hydridového aniontu.
- 6. Rozpoznávání neutrálních molekul. Anorganické a organické klatráty (zeolity, močovina, dianin ad.). Cyklodextriny. Supramolekulární chemie fullerenů.
- 7. Struktura a stabilita molekulárních komplexů. Definice komplexační konstanty. Určení stechiometrie komplexu. Nejčastěji používané metody studia komplexů.
- 8. Dendrimery. Příprava a vlastnosti dendrimerů. Supramolekulární aplikace dendrimerů.
- 9. Supramolekulární syntéza, krystalové inženýrství. Mezimolekulové interakce. Růst krystalu. Strategie designu. Využití H-vazby, pí-pí stackingu a dalších interakcí.
- 10. Samovolná organizace (self-assembly, SA). Biochemická SA. SA v syntéze. Katenany a rotaxany. Helikáty, Programované supramolekulární syntézy. Uspořádávání
- 11. Supramolekulární reaktivita a katalýza. Příklady receptorů uplatňujících se v katalýze. Biologická mimika. Různé modely enzymových systémů.
- 12. Supramolekulární interakce v transportních procesech. Nosiče využívané v jednotlivých typech transportů. Povrchově aktivní látky. Micely, vesikuly. Preorganizace surfaktantů.
- 13. Supramolekulární "zařízení". Přenos informace, semiochemie. Supramolekulární fotochemie. Fotonická zařízení. Supramolekulární elektronická zařízení - přepínače, vodiče a polovodiče, usměrňovače. Nelineární optické materiály.
- 14. Kapalné krystaly. Povaha a struktura kapalných krystalů. Chemické struktury uplatňující se při konstrukci kapalných krystalů. Aplikace kapalných krystalů.

Výukové metody: Přednášky

Metody hodnocení: Ústní zkouška, případně kolokvium.

Literatura:

- Lhoták, Pavel - Stibor, Ivan. *Molekulární design*. Vyd. 1. Praha : Vydavatelství VŠCHT, 1997. [267] s. ISBN 80-7080-294-4. info
- Steed, Jonathan, W. - Atwood, Jerry L. *Supramolecular Chemistry*. Chichester: Wiley, 2000
- Lehn, Jean-Marie. *Supramolecular chemistry : concepts and perspectives*. Weinheim : VCH Verlagsgesellschaft, 1995. 271 s. ISBN 3-527-29311-6. info
- Vögtle, Fritz. *Supramolecular chemistry : an introduction*. Translated by Michel Grognez. Chichester : John Wiley & Sons, 1991. viii, 337. ISBN 0-471-94061-5. info

C8950 NMR - Strukturní analýza

Vyučující: [prof. RNDr. Radek Marek Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

Cíle předmětu: NMR spektroskopie jako jedna z nejdůležitějších strukturně-analytických metod zaujímá významné místo ve výzbroji každého chemika. Předmět NMR strukturní analýza by měl absolventovi umožnit základní orientaci v problematice řešení struktury přírodních produktů a organických sloučenin pomocí vysokorozlišovací NMR spektroskopie. Hlavní důraz je kladen na interpretaci a extrakci informací ze základních typů 2D spekter (COSY, NOESY, HSQC, HMBC).

Osnova:

- **1. Některé aspekty NMR** - úvod, metody magnetické rezonance, vznik NMR signálu, typy jaderných interakcí, chemický posun, interakční konstanta, příklady, Fourierova transformace - relaxace jader (inversion recovery), selektivní excitace, potlačení signálu rozpouštědla, NOE; **2. Konstrukce spektrometrů** - magnety, sondy, kyvety a propojení s HPLC, MS; **3. Editační techniky** - spinové echo, APT - přenos polarizace, INEPT, DEPT; **4. NMR spektroskopie ve více dimenzích - homonukleární korelace** - korelační spektroskopie (COSY) - interakce dalekého dosahu (LR-COSY, Relayed COSY) - TOCSY; **5. Heteronukleární korelace** - jednovazebné (HETCOR) - dalekého dosahu (LR-HETCOR, COLOC); **6. Měření J konstant** - J spektroskopie - jiné techniky-korelace chemických posunů, časová doména; **7. Interakce dipól-dipól** - selektivní NOE - 2D NOESY; **8. Vícekvantová spektroskopie** - MQF-COSY - INADEQUATE; **9. NMR spektroskopie jiných jader než ¹H a ¹³C** - ¹⁵N, ³¹P, ⁷⁷Se (¹⁹F, ²⁹Si, ¹¹¹Cd a ¹¹³Cd, ¹¹⁷Sn a ¹¹⁹Sn, ¹²⁵Te, ¹⁹⁵Pt a ²⁰⁷Pb); **10. Inverzní experimenty** - jednovazebné (HMQC, HSQC) - dalekého dosahu (HMBC, HSQC) - kombinované techniky (HMQC-TOCSY, HSQC-TOCSY, HSQC-NOESY); **11. Gradientní NMR spektroskopie** - homokorelační spektroskopie - NOESY - heterokorelační inverzní metodiky; **12. Nepřímá spin-spinová interakce a přímá interakce dipól-dipól** - informace pro řešení prostorové struktury

molekul - J konstanty a informace o dihedralních úhlech - NOE a meziatomové vzdálenosti - vstupní data pro molekulovou mechaniku; **13. Praktické aspekty** - typy sond, logická struktura analýzy, citlivost experimentů; **14. Praktické příklady a interpretace spekter**

Výukové metody: Přednášky

Metody hodnocení: výuka probíhá každý týden, zakončení zkouškou s písemnou event. ústní částí.

Literatura:

povinná literatura

- Claridge, Timothy D.W. High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry: Pergamon, 1999 382s. ISBN 0-08-0427987

doporučená literatura

- Rahman, Atta-ur-. *Solving problems with NMR spectroscopy*. Edited by Muhammad Iqbal Choudhary. San Diego : Academic Press, 1995. xvi, 430 s. ISBN 0-12-066320-1. info
- Rahman, Atta-ur-. *One and Two Dimensional NMR Spectroscopy*. 1. vyd. Amsterdam : Elsevier Science Publishers B.V., 1989. 578 s. ISBN 0-444-87316-3. info
- Breitmaier, Eberhard. *Structure elucidation by NMR in organic chemistry : a practical guide*. Translated by Julia Wade. Chichester : John Wiley & Sons, 1993. 265 s. ISBN 0-471-93381-3. info

neurčeno

- Braun, Siegmur - Kalinowski, Hans - Otto - Berger, Stefan. *150 and more basic NMR experiments : a practical course*. 2nd exp. ed. Weinheim : Wiley-VCH, 1998. 595 s. ISBN 3-527-29512-7. info
- Braun, Siegmur - Kalinowski, Hans - Otto - Berger, Stefan. *100 and more basic NMR experiments : a practical course*. Weinheim : VCH Verlagsgesellschaft, 1996. xii, 418 s. ISBN 3-527-29091-5. info
- <http://staffold.vscht.cz/nmr/subpages/predmet.html>

C9000 Oborový seminář III

Vyučující: [doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.](#)

Rozsah: 0/2/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Zprávy o postupu a prezentace výsledků samostatných projektů, diplomových a disertačních prací. Informace z literatury o nejnovějších výsledcích a vývoji v oboru. Referátové zpracování přehledných článků. Studenti se naučí správně interpretovat vědecké poznatky z literatury a prezentovat výsledky vlastní výzkumné práce.

Osnova:

- Probírají se aktuální témata výzkumu prováděného na fakultě v oboru chemie.

Výukové metody: Diskuse, četba, prezentace, skupinové projekty, domácí úlohy atd.

Metody hodnocení: Zápočet je udělen za účast na semináři a aktivní vystoupení studenta.

Literatura:

- Odborná literatura podle zaměření semináře.
- Current journals specified by the lecturers
- *Journal of the American Chemical Society*. 2009. ISSN 0002-7863. info
- *Angewandte Chemie International Edition*. 2009. ISSN 1433-7851. info

C9001 Diplomová práce III

Vyučující: vedoucí práce

Rozsah: 0/0/12. 12 kr. Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Předmět diplomová práce je koncipován jako kurz motivující studenta ke zpracování výsledků vlastního výzkumu ve formě diplomové práce splňující veškeré požadavky na ni kladené. Absolvování tohoto kurzu a kurzů navazujících zajistí, že student odevzdá diplomovou práci odsouhlasenou vedoucím. Navíc student hlouběji porozumí výzkumným metodám používaným v dané oblasti, bude schopen samostatné výzkumné činnosti a bude si uvědomovat etické aspekty vědecké práce.

Osnova:

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

Výukové metody: Vlastní rešeršní činnost, výzkumná práce v laboratoři, konzultace s vedoucím.

Metody hodnocení: Zápočet je udělený za úspěšný postup v přípravě práce.

Literatura:

- Eco, Umberto - Seidl, Ivan. *Jak napsat diplomovou práci*. Olomouc : Votobia, 1997. 271 s. ISBN 80-7198-173-7. info
- Literatura dle doporučení vedoucího diplomové práce (Literature according to the recommendation of the thesis supervisor)

C9500 Užitá chemie

Vyučující: [doc. RNDr. Pavel Pazdera CSc.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (plus ukončení). Doporučované ukončení: k. Jiná možná ukončení: zk.

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět a vysvětlit aplikace prvků, chemických sloučenin a jejich směsí lidskou populací.

Osnova:

- Surovinová základna chemie. Rozdělení surovinových a energetických zdrojů. Perspektivy využívání alternativních surovinových a energetických zdrojů, výhody a slabé stránky. Odpady, jejich klasifikace, nakládání s odpady, jejich druhotné využití. Udržitelný rozvoj a chemie. Principy, cíle a metody chemie pro udržitelný rozvoj (Zelené chemie). Sledování životního cyklu (chemického) výrobku (analýza životního cyklu, ekobalance). Materiály (keramika, sklo, stavební materiály, hutní materiály a materiály pro elektrotechniku, kompozitní materiály). Plasty, výroba monomerů, druhy plastů a typy polymerací, aplikace. Korozie jako obecný jev - pozitiva a negativa. Ochrana proti korozi, koroze kovů, stárnutí plastů a způsoby jejich stabilizace, řízená degradace. Paliva, výroba tuhých, kapalných a plyných paliv, jejich aplikace. Alternativní paliva a jejich perspektivy. Maziva. Výbušiny a výbušniny. Základní pojmy, strukturní typy výbušin, druhy výbušnin a jejich aplikace. Tenzidy, principy účinku, základní typy, ionogenní a neionogenní tenzidy. Přírodní, polosyntetické a syntetické tenzidy. Jejich výroba a způsoby užití. Prací a mycí proces, detergenty, solubilizátory, smáčedla, emulgátory, stabilizátory heterogenních směsí, avivážní a podobné pomocné přípravky. Leštidla a pasty. Barviva a pigmenty, strukturní principy, typy, barvicí procesy, výroba základních typů, optická bělidla a zjasňovače. Nátěrové hmoty, laky, barvy, emaily, tmely, fermeže. Moderní ekologicky šetrné nátěrové kompozice. Kosmetické prostředky. Rozdělení a funkce, suroviny pro kosmetiku. Princip barvení vlasů a „studené vlny“. Léčiva, rozdělení, struktura a účinek, přehled léčiv. Synergismus a antagonismus, výzkum a vývoj nových léčiv. Generické přípravky. Správná praxe aplikace antibiotik a chemoterapeutik. Fytoefektory, jejich definice. Pesticidy a jejich rozdělení, hlavní užití strukturní motivy. Růstové stimulanty, výživa rostlin. Výzkum a vývoj nových fytoefektorů s ohledem na životní prostředí, Stockholmská úmluva.

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: Přednáška, ústní zkouška.

Literatura:

povinná literatura

- λ Kuchař M., Výzkum a vývoj léčiv, 1. vyd. Praha: VŠCHT, 2008. ISBN 978-80-7080-677-7, http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_isbn-978-80-7080-677-7/pages-img/obsah.html
- Pichler, Jiří. *Užitá chemie*. 1. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 1999. 254 s. ISBN 80-210-2016-4. info
- λ Hampl F., Rádl S., Paleček J., Farmakochemie, 1. vyd. Praha: VŠChT, 2002. ISBN 80-7080-495-5. http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_isbn-80-7080-495-5/pages-img/obsah.html

doporučená literatura

- Pichler, Jiří. *Chemie ve společnosti*. 1. vyd. Brno : Rektorát Masarykovy university, 1992. 199 s. ISBN 80-210-0364-2. info
- λ http://cs.wikipedia.org/wiki/Hlavn%C3%AD_strana.
- λ Vojtěch D., Kovové materiály, 1. vyd. Praha: VŠChT, 2006. ISBN 80-7080-600-1, http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_isbn-80-7080-600-1/pages-img/obsah.html.

- Pichler, Jiří. *Základní chemické výroby : (organická část)*. 1. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 1998. 99 s. ISBN 80-210-1757-0. info
- Pichler, Jiří. *Fyziologicky aktivní látky*. 1. vyd. Brno : Universita J.E. Purkyně, 1986. 94 s. info
- λ Brož, J., *Receptář chemicko-technický*, 2. vyd. Praha: Volvox Globator, 1998, 986 s. ISBN 80-7207-136-X.
- Pichler, Jiří. *Technologie základních organických látek, tenzidy, barviva a pigmenty*. 1. vyd. Brno : Univerzita Jana Evangelisty Purkyně, 1987. 81 s. info
- λ Feřteková V., a kol., *Kosmetika v teorii a v praxi*, 4. upravené vyd. Praha: Maxdorf, 2005, ISBN: 80-7345-046-1.

neurčeno

- λ http://en.wikipedia.org/wiki/Main_Page.
- Pichler, Jiří. *Chemická technologie základních organických látek*. Vyd. 1. Brno : Masarykova univerzita, 1992. 102 s. ISBN 80-210-0553-. info

C9920 Úvod do kvantové chemie

Vyučující: [Mgr. Markéta Munzarová Dr. rer. nat.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: zk.

Cíle předmětu: Charakteristika předmětu: Jedná se o jednosemestrální uvedení do problematiky základů metod kvantové chemie a jejich aplikace na reprodukci, interpretaci a predikci experimentálních dat pro reálné chemické systémy. Kurz je zaměřen na poskytnutí teoretického základu potřebného pro studenty, kteří uvažují o využití metod kvantové chemie ve svých vlastních výzkumných úkolech nebo kteří tak již činí. Využití matematiky je omezeno na nezbytné minimum; základní kvantově-mechanické koncepty jsou zavedeny v rámci přednášky na konkrétních příkladech. Cíle předmětu: Pochopení základních konceptů kvantové mechaniky na jednoduchých reálných chemických systémech; osvojení principů výpočetních metod kvantové chemie; osvojení základních pravidel kvalitativní teorie MO umožňující orientaci ve vypočtených datech a propojení ke konceptům užívaných experimentálními chemiky.

Osnova:

- 1. Základní koncepty kvantové mechaniky. Historie a současnost kvantové chemie (QCH). 2. Atom vodíku. 3. Atomy s více elektrony. 4. Molekulový ion H_2^+ : Metoda MO-LCAO. 5. Molekuly s více elektrony: Jednoduchá a rozšířená Hueckelova metoda (HMO a EHT). 6. Kvalitativní popis elektronové struktury. Symetrie. Orbitalní interakce. 7. Interakční a korelační diagramy malých molekul. 8. "Ab initio" kvantová chemie: Metoda Hartree-Fockova (HF). 9. Nadstavby HF metody: Konfigurační interakce (CI), Poruchová metoda (MP), Metoda spřažených klastrů (CC). 10. Metoda funkcionálu hustoty (DFT). 11. Hierarchie ab initio metod, jejich vztah ke klasické a kvantové molekulové dynamice (MD). 12. Strategie aplikace QM metod na chemické problémy. Cíle předmětu: Pochopení základních konceptů kvantové mechaniky na jednoduchých reálných chemických systémech; osvojení principů výpočetních metod kvantové chemie; osvojení základních pravidel kvalitativní teorie MO umožňující orientaci ve vypočtených datech a propojení ke konceptům užívaných experimentálními chemiky.

Výukové metody: Přednášky, diskuse v hodině, konzultace.

Metody hodnocení: ústní zkouška.

Literatura:

- Lowe, John P. *Quantum chemistry*. 2nd ed. San Diego : Academic Press, 1993. xx, 711 s. ISBN 0-12-457555-2. info
- Levine, Ira N. *Quantum chemistry*. 5th ed. Upper Saddle River : Prentice Hall, 1999. x, 739 s. ISBN 0-13-685512-1. info
- Pilar, Frank L. *Elementary quantum chemistry*. 2nd ed. New York : McGraw-Hill Publishing Company, 1990. xvi, 599 s. ISBN 0-07-050093-2. info
- Koch, Wolfram - Holthausen, Max C. *A chemist's guide to density functional theory*. 2nd ed. Weinheim : Wiley-VCH, 2002. xiii, 300. ISBN 3-527-30422-3. info

JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška

Vyučující: [Mgr. Věra Hranáčová](#)

Rozsah: 0/0. 2 kr. Ukončení: zk.

Cíle předmětu: Zkouška prověří, že student je schopen zvládat následující dovednosti odpovídající úrovni B2 ERR - odborný jazyk porozumět odbornému textu/mluvenému projevu identifikovat hlavní myšlenky formulovat hlavní myšlenky interpretovat informaci z textu/mluveného projevu shrnout náročnější odborný text klasifikovat, porovnávat, určit příčiny a důsledky, popsat proces, definovat prezentovat odborný text vztahující se ke studovanému oboru za použití pokročilých prezentačních technik diskutovat o obecných a odborných tématech hovořit o svém oboru - disponovat základní slovní zásobou svého oboru argumentovat

Osnova:

- 1. Písemná část
- a) Akademická část - gramatika odborného textu viz <http://www.sci.muni.cz/main.php?stranka=Jazyky&podtext=A2>
- b) Odborný text - slovník k dispozici (porozumění textu, shrnutí)
- 2. Ústní část
- Prezentace odborného textu vztahujícího se ke studovanému oboru - téma dle vlastního výběru, ale obsah srozumitelný i pro posluchače jiných oborů, v rozsahu 10 minut s využitím veškerých prezentačních technik, popř. názorných pomůcek. Je třeba prokázat i schopnost reagovat na otázky publika.

Výukové metody: Zkouška

Metody hodnocení: Písemný test, ústní zkouška

Literatura:

- Jeremy Comfort. *Effective Presentations*. OUP 2000.
- Douglas Bell: *Passport to Academic Presentations*. Garnet 2008.
- *Academic vocabulary in use*. Edited by Michael McCarthy - Felicity O'Dell. Cambridge : Cambridge University Press, 2008. 176 s. ISBN 978-0-521-68939. info
- Keith Kelly: *Science*. Macmillan 2008
- *Key words in science & technology : helping learners with real English*. Edited by Bill Mascull. 1st ed. London : Harper Collins Publishers, 1997. xii, 210 s. ISBN 0-00-375098-1. info
- *Academic writing course : study skills in English*. Edited by R.R Jordan. 1st ed. Essex : Longman, 1999. 160 s. ISBN 0-582-40019-8. info
- *English for science*. Edited by Fran Zimmerman. New Jersey : Regents/Prentice Hall, 1989
- Donovan, Peter. *Basic English for Science*. 10. vyd. Oxford : University Press, 1994. 153 s. ISBN 0-19-457180-7. info
- *Nucleus ; English for science and technology*. Edited by Martin Bates - Tony Dudley-Evans. info
- *Physics: Reader*. Ivana Tulajová, Masarykova univerzita Přírodovědecká fakulta 2000
- Plummer, Charles C. - McGeary, David. *Physical geology : student study art notebook*. 7th ed. Dubuque : Wm. C. Brown Communications, 1996. 161 s. ISBN 0-697-28732-7. info
- Strahler, Alan H. - Strahler, Arthur Newell. *Introducing physical geography*. 4th ed. Hoboken, N.J. : J. Wiley, 2006. xxv, 728 s. ISBN 0-471-67950-X. info
- Murphy, Raymond. *English grammar in use : a self-study reference and practice book for intermediate students of English : with answers*. 3rd ed. Cambridge : Cambridge University Press, 2004. x, 379 s. ISBN 0-521-53762-2. info
- Cunningham, Sarah - Bowler, Bill. *Headway : intermediate : pronunciation*. 1. vyd. Oxford : Oxford University Press, 1990. xi, 112 s. ISBN -19-433968-8. info
- +Any materials aimed at preparation for B2 level examinations(e.g. FCE, TOEFL)