

## Obor **Anorganická chemie**

Státní závěrečná zkouška sestává ze dvou povinných předmětů a jednoho volitelného předmětu zvoleného ze tří možností, který nejlépe odpovídá zaměření diplomové práce.

### Povinné předměty

- Systematická anorganická chemie
- Struktura a vlastnosti anorganických sloučenin a metody jejich studia

### Volitelné předměty

- Koordinační chemie
- Chemie pevné fáze a anorganických materiálů
- Organometalická chemie

Zkouška 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.

## Okruhy otázek:

### Povinné předměty

#### 1. Systematická anorganická chemie

Obecná charakteristika prvků hlavních a vedlejších skupin a jejich vazebné možnosti. Periodické trendy ve fyzikálních a chemických vlastnostech prvků. Mono- a polynuklidické prvky, stabilní izotopy. Nekovové prvky a jejich krystalová a molekulová struktura. Allotropie a polymorfie prvků, allotropy chalkogenů, prvků 15. skupiny, uhlíku a boru. Vazba v homonukleárních dvouatomových molekulách. Spinová izomerie, ortho- a para-vodík. Kyseliny a baze, relativní acidita, superkyseliny, tvrdé a měkké kyseliny a baze. Hydridy, vazba v binárních hydridech, jejich struktura, fyzikální vlastnosti a metody přípravy.

Alkalické kovy a jejich sloučeniny, organolithné sloučeniny. Iontové sloučeniny a jejich základní strukturní typy. Berylium, hořčík a kovy alkalických zemin. Rozpustnost anorganických sloučenin. Grignardovo činidlo. Bor, diboran, elektronově deficitní molekuly a třícenterní dvouelektronová vazba. Hydroborace. Borany, karborany a jiné heteroborany. Teorie elektronových párů v polyedrických skeletech (PSEPT) a předpověď struktury boranových klastrů. Halogenidy boru. Oxidy, kyselina boritá a boritany. Borazany a nitrid boru. Hliník, gallium, indium, thallium. Oxidy, korund a spinel. Amfoterní vlastnosti  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . MAO. Polyiminoalany.

Uhlík, karbidy. Vazba v molekulách fullerenů a jejich chemická reaktivita. Endohedrání sloučeniny fullerenů, nanotrubic. Chemické vlastnosti grafitu. Interkaláty grafitu. Křemík, germanium, cín, olovo. Kovy, polovodiče a izolanty. Inertní elektronový pár. Násobné vazby mezi prvky hlavních skupin. Silikáty, alumosilikáty, zeolity. Silikony. Dusík. Oxidy a kyseliny dusíku. Amoniak, binární nitridy. Komplexy  $\text{N}_2$  a fixace dusíku. Fosfor, fosfany, fosforany, fosforečnany, fosfazeny. Hypervalentní sloučeniny. Organofosfáty. Arsen, antimon, bismut. Struktura a chemie Zintlových fází. Singletové a tripletové stavy molekuly kyslíku. Oxidy, metody přípravy, struktura a chemické vlastnosti. Chemie oxokyselin a jejich solí. Peroxidy, superoxidy a ozonidy. Sulfidy, selenidy a telluridy. Chemie thiokyselin, jejich solí a dalších derivátů. Kationty a anionty chalkogenů. Halogeny, jejich oxidy a oxokyseliny. Halogenidy, příprava, struktura a chemické vlastnosti binárních a smíšených halogenidů. Interhalogenové sloučeniny. Vzácné plyny a jejich sloučeniny.

Koordinační chemie, oktaedrické, tetraedrické, čtvercově planární a trigonálně bipyramidální komplexy. Stabilizační energie ligandového pole. Vysokospinové a nízkospinové komplexy, spektrochemická řada. Vazba v koordinačních sloučeninách, teorie ligandového pole. Stereochemie a izomerie koordinačních sloučenin. Obecné periodické trendy u přechodných kovů. Přechodné kovy 3. skupiny a vzácné zeminy, lanthanoidová kontrakce. Titan, zirkonium, hafnium, Krollův proces. Ziegler-Nattovy a metallocenové katalyzátory. Vanad niob, tantal. Oxo a polyoxoanionty. Chrom, molybden, wolfram. Iso- a

heteropolyoxoanionty. Bronzy. Trojná a čtvorná vazba. Klastrové sloučeniny. Mangan, technecium, rhenium. Triáda železa. Oxidy železa a výroba železa. Ferrocen. Hydrogenace a hydrogenační katalyzátory. Wilkinsonův katalyzátor. Platinové kovy. Homogenní katalýza. Vaskův komplex. Spin-orbitální interakce. Trans efekt. Skupina 11-mincovní kovy. Měď, stříbro, zlato. Jahn-Tellerův efekt. Supravodiče. Aurofilicita. Zinek, kadmium, rtuť, metalloenzymy. Aktinoidy. Uran a jeho sloučeniny, příprava a použití.

## 2. Struktura a vlastnosti anorganických sloučenin a metody jejich studia

Tvar a geometrie molekul nepřechodných prvků, model VSEPR. Symetrické vlastnosti molekul, prvky a operace symetrie, základní pojmy teorie grup. Elektronová struktura atomů a iontů, atomové orbitály, kovalentní chemická vazba. Valenčně-vazebná teorie. Teorie ligandového pole, štěpení degenerovaných energetických hladin, diagramy energetických hladin, Jahn-Tellerův efekt, spektrální a magnetické vlastnosti komplexů. Teorie molekulových orbitalů. Symetrie krystalů, trojrozměrné mřížky a krystalografické soustavy, primitivní buňka, 14 Bravaisových mřížek, 32 krystalografických tříd, trojrozměrné prostorové grupy. Izomerie chemických sloučenin, strukturní izomerie a stereoizomerie, izomerie koordinačních sloučenin, optická izomerie, asymetrie a dissymetrie, chiralita, enantiomerie a optická aktivita, diastereoizomery. Konformace acyklických a cyklických sloučenin, stereochemicky nerigidní a fluxní molekuly, geometrie molekul koordinačních sloučenin, struktura anorganických polymerů, geometrie polyedrických molekul, struktura boranů, klastery.

Difrakce rentgenova záření, difrakce na souboru rovin, přímá a reciproká mřížka, Ewaldova konstrukce, interference, Laueho a Braggova metoda. Zdroje a detektory rentgenova záření, difraktometry. Fázový problém, Pattersonovské a přímé metody, upřesňování modelu, R-faktory, metoda nejmenších čtverců. Krystalografické databáze. Difrakce elektronů, elektrony jako částice i záření. Absorpce elektronů a gama záření. Moessbauerova spektroskopie, isotopový posun, kvadrupolové štěpení. Hmotnostní spektrometrie, metody ionizace, hmotnostní separace, detekce. Fotoelektronová spektroskopie, XPS, ESCA, Auger, UPS. Rtg. fluorescence. Absorpce UV a VIS záření, Franckův-Condonův princip, fluorescence, fosforescence. Elektronová spektra komplexních sloučenin, absorpční spektra komplexů v UV a VIS oblasti, typy elektronových přechodů, výběrová pravidla, intenzity a pološířky d-d-pásů, spin-orbitální interakce, Tanabeho a Suganovy diagramy. Molekuly v elektrickém poli, polarizovatelnost, dipolový moment, permitivita dielektrika. Polarizace, měření dipolových momentů. Index lomu a molární refrakce. Molekulová vibrační spektroskopie, harmonický a anharmonický oscilátor, energie vibračních hladin, translační, rotační a vibrační stupně volnosti, vibrační kvantová čísla, typy normálních vibrací, přechody mezi energetickými hladinami, výběrová pravidla, valenční a deformační vibrace. Infračervená a Ramanova spektroskopie, Rayleighův a Ramanův rozptyl, anisotropie polarizovatelnosti, depolarizace, Stokesovy a antistokesovy přechody. Interpretace vibračních spekter, empirická pravidla, charakteristické frekvence, princip normální souřadnicové analýzy. Mikrovlnná spektroskopie. Lom světla Snellův zákon, měření indexu lomu, vliv elektrického pole, Kerrův efekt. Optická aktivita, specifická otáčivost, Cottonův efekt, optická rotační disperse, cirkulární dichroismus. Optická otáčivost a struktura, oktantové pravidlo.

Molekuly v magnetickém poli, magnetizace, magnetická susceptibilita. Diamagnetické, paramagnetické, ferromagnetické vlastnosti, Curieův zákon. Elektronová paramagnetická rezonanční spektroskopie, podmínka resonance, Landého g-faktor, hyperjemné štěpení. Nukleární magnetická rezonanční spektroskopie, jaderný spin, magnetogyrický poměr, Larmorova frekvence, stínící konstanta, diamagnetické a paramagnetické stínění, Ramseyův vzorec, parametry ovlivňující stínící konstantu, normální a inverzní halogenová závislost, nefelauxetická a spektrochemická řada, chemický posun, korelace chemických posunů, magnetická anisotropie, chemická ekvivalence a symetrie molekul, dipolární interakce, NMR spektroskopie v pevné fázi, skalární interakce, vlivy na interakční konstantu, relaxace, relaxační časy T1 a T2, relaxační mechanismy, dynamická NMR spektroskopie, chemická výměna. Termická analýza, termogravimetrie, diferenční skenovací kalorimetrie.

## **Volitelné předměty**

### 1. Koordinální chemie

Koordinální sloučeniny, koordinální částice, centrální atom, ligandy a jejich klasifikace, vlastnosti ligandů, koordinální číslo a koordinální polyedry, stereochemie a izomerie koordinálních sloučenin, stereochemicky nerigidní molekuly a ionty, stabilita komplexu. Vazba v koordinálních sloučeninách, teorie ligandového pole. Mechanismy tvorby komplexních sloučenin, trans-efekt. Typy komplexotvorných činidel: chelátotvorná činidla, činidla vhodná pro tvorbu iontových asociátů, organofosforová činidla. Metody studia komplexních sloučenin: spektrofotometrické, extrakční, ionexové aj. Tvorba chelátů a iontových asociátů, teorie extrakce, vlivy prostředí na extrakci komplexních sloučenin, substechiometrická extrakce, izotopické zředování.

### 2. Chemie pevné fáze a anorganických materiálů

#### *Strukturní chemie*

Kovová, iontová a kovalentní vazba, iontové poloměry, mřížková energie, koordinální polyedry, základní strukturní typy, Paulingova pravidla. Krystalová struktura, defekty. Elektronová struktura pevných látek, pásová teorie. Elektrické, mechanické, termické, optické, a magnetické vlastnosti pevných látek. Nanočástice, povrchové a kvantové efekty.

#### *Syntéza anorganických materiálů*

Přímé reakce v pevné fázi a jejich kinetika. Samoudržující se exotermické reakce, spalovací reakce, pyrolýza. Mechanochemická, mikrovlnná a sonochemická syntéza. Chemie vysokých tlaků, diamantová cela. Transportní reakce v plynné fázi, pyrolýza aerosolů. Syntézy v taveninách solí a iontové kapaliny. Sol-gelové a hydrotermální reakce. Zeolity, mesoporózní materiály, MOF, vrstevnaté materiály, interkalace. Příprava monokrystalů. Tenké filmy, chemická depozice z plynné fáze, samouspořádané monovrstvy, depozice atomových vrstev. Nanostrukturní materiály, syntéza top-down a bottom-up.

### 3. Organometalická chemie

Charakteristika organokovových sloučenin, typy vazeb. Organokovy prvků 1. a 2. skupiny, Grignardova činidla. Organoborany, halogeno- a hydridoorganoborany, karborany, organoderiváty hliníku a podskupiny zinku. Organosilany, sloučeniny s vazbou Sn-C a Pb-C. Organosloučeniny prvků 15. skupiny. Organosloučeniny přechodných kovů. Sloučeniny se sigma ligandy -alkyl, aryl, acyl, alkenyl, alkinyl. Karbonyly. Karbenové a olefinové komplexy. Allylové, cyklopropenylové a karbinové komplexy. Butadienové a cyklobutadienové komplexy. Metalloceny. Arenové komplexy, acetylenové komplexy. Základní reakce, koordinace olefinů, substituční reakce, oxidativní adice a redukční eliminace, reakce inserční a deinsereční a reakce koordinovaných ligandů. Katalýza, polymerizace a oligomerizace alkenů a alkinů, syntézy s oxidem uhelnatým. Hydroformylace olefinů, karboxylace olefinů a methanolu, reakce vodního plynu, hydrogenační reakce.

#### Literatura:

- Toužín, J. *Stručný přehled chemie prvků*. Skripta MU Brno, 2003.
- Greenwood, N. N. - Earnshaw, A. *Chemie prvků I, II*. Informatorium, Praha, 1993.
- Klikorka, J. - Hájek, B. - Votinský, J. *Obecná a anorganická chemie*. SNTL, Praha, 1989.
- House, J. - House, K. A. *Descriptive Inorganic Chemistry*. Academic Press, 2010.
- Wulfsberg, G. *Principles of Descriptive Inorganic Chemistry*. University Science Books, 1991.
- Housecroft, C. E. - Sharpe, A. *Inorganic Chemistry*. Prentice Hall, New York, 2012.
- Cotton, F. A. - Murillo, C. - Wilkinson, G. - Bochmann, M. - Grimes, R. *Advanced Inorganic Chemistry*. Wiley-Interscience, New York, 1999.
- Greenwood, N. N. - Earnshaw, A. *Chemistry of the Elements*. Butterworth - Heinemann, Oxford, 1997.
- Rayner-Canham, G. - Overton, T. *Descriptive Inorganic Chemistry*. W. H. Freeman, 2009.
- Rodgers, G. E. *Descriptive Inorganic, Coordination, and Solid-State Chemistry*. Cengage Learning, 2011.
- Shriver, D., Peter Atkins, P. *Inorganic Chemistry*. W. H. Freeman, 2009.
- Holleman, A. F. , Wiberg, E., Wiberg, N. *Inorganic Chemistry*. Academic Press, 2001.
- Elschenbroich Ch. - Salzer A. *Organometallics*, VCH Publishers, New York 1989.
- Kašpárek F. *Přehled organosloučenin přechodných kovů*. UP Olomouc 1994.
- Kašpárek F. *Chemie organokovových sloučenin*. UP Olomouc 1991.
- Hill A. F. *Organotransition Metal Chemistry*. Royal Society of Chemistry, Cambridge 2001.
- Ebsworth, E.A.V., Rankin, D.W.H., Cradock, S. *Structural methods in inorganic chemistry*. 2nd ed. - Boca Raton, Fla. : CRC Press, 1991.

- Rankin, D. W. H., Mitzel, N., Morrison, C. *Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry*. Wiley, 2013. ISBN 0470972793.
- Toužín, J., Černík, M. *Vibrační spektroskopie molekul a krystalů*. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1980.
- Schubert, U., Hüsing, N. *Synthesis of Inorganic Materials. 3rd Ed. 2012. ISBN 978-3-527-32714-0 - Wiley-VCH, Weinheim.*
- Nakamoto, K. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Applications in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry*. ISBN 0470405872. John Wiley & Sons, 2009.
- Toužín, J., Černík, M. *Základy stereochemie anorganických sloučenin*. SPN, 1985
- Gillespie, R. J., Popelier, P. L. A., Vargas-Baca, I. *Chemical Bonding and Molecular Geometry: From Lewis to Electron Densities*. Oxford University Press, 2007.
- von Zelewsky, A. *Stereochemistry of Coordination Compounds*. John Wiley & Sons, 1996.
- Müller, U. *Inorganic Structural Chemistry*. John Wiley & Sons, 2007.
- Wells, A. F. *Structural Inorganic Chemistry*. OUP Oxford, 2012.