

MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA



ŽÁDOST O AKREDITACI

Navazujícího magisterského studijního programu

C h e m i e

Obor

A n a l y t 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 | 2 |
| Obor: Analytická chemie | 3 |
| B – Charakteristika studijního programu a jeho oborů, pokud se na obory člení..... | 3 |
| C – Pravidla pro vytváření studijních plánů SP (oboru) a návrh témat prací | 5 |
| C1- Doporučený studijní plán | 15 |
| E – Personální zabezpečení studijního programu (studijního oboru) – souhrnné údaje..... | 19 |
| F – Související vědecká, výzkumná, vývojová, umělecká a další tvůrčí činnost | 20 |
| I – Uskutečňování akreditovaného stud. programu mimo sídlo vysoké školy | 21 |
| D – Charakteristika studijních předmětů..... | 22 |
| Bi7072 Bioanalytika II - Analytické metody v klinické praxi | 22 |
| Bi7942 Bioanalytika I - Biomakromolekuly | 22 |
| CA000 Oborový seminář IV | 23 |
| CA001 Diplomová práce IV | 24 |
| C2105 Počítač v analytické laboratoři | 24 |
| C3700 Jakost v analytické laboratoři | 24 |
| C5020 Chemická struktura..... | 25 |
| C5030 Chemická struktura - seminář..... | 26 |
| C5040 Jaderná chemie | 26 |
| C5120 Počítače v chemii a chemometrie | 28 |
| C5140 Počítače v chemii a chemometrie - cvičení | 28 |
| C5241 Analytická chemie organických látek..... | 29 |
| C5350 Analytická chemie III | 30 |
| C5355 Analytická chemie III - seminář | 31 |
| C6020 Jaderná chemie - laboratorní cvičení | 31 |
| C6140 Optimalizace a hodnocení analytických metod | 31 |
| C6170 Analýza materiálů - cvičení | 32 |
| C6250 Metody chemického výzkumu - praktikum | 32 |
| C6290 Atomová absorpční spektrometrie..... | 33 |
| C6300 Optická a hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem | 34 |
| C6410 Organická analýza - praktikum..... | 35 |
| C6950 Chemická exkurze | 35 |
| C6960 Odborná praxe | 36 |
| C7000 Oborový seminář I..... | 36 |
| C7001 Diplomová práce I..... | 36 |
| C7030 Separční metody | 37 |
| C7031 Atomová spektrometrie | 38 |
| C7041 Molekulová spektrometrie..... | 39 |
| C7050 Elektroanalytické metody..... | 40 |
| C7060 Stopová analýza..... | 41 |
| C7080 Lasery v analytické chemii | 42 |
| C7777 Zacházení s chemickými látkami..... | 43 |
| C7830 Kapilární elektroforéza | 43 |
| C7895 Hmotnostní spektrometrie biomolekul | 44 |
| C7950 Speciační analýza | 45 |
| C7955 Molekulová luminiscence..... | 46 |
| C8000 Oborový seminář II..... | 47 |
| C8001 Diplomová práce II..... | 47 |
| C8102 Speciální metody - laboratorní cvičení | 47 |
| C8820 Metody studia rovnováh a kinetiky reakcí..... | 49 |
| C8880 Vybrané metody analýzy pevných látek | 50 |
| C9000 Oborový seminář III | 50 |
| C9001 Diplomová práce III | 51 |
| JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška | 51 |

| 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 | Analytická chemie – prodloužení akreditace | | Ano | 1403T001 |
| Obory v jiných dokumentech | Anorganická chemie - prodloužení akreditace | | Ano | 1401T002 |
| | Fyzikální chemie - prodloužení akreditace | | Ano | 1404T001 |
| | Chemie životního prostředí - prodloužení akreditace | | Ano | 2805T003 |
| | Materiálová chemie - prodloužení akreditace | | Ano | 1407T007 |
| | Organická chemie - prodloužení akreditace | | Ano | 1402T001 |
| | Strukturní chemie - prodloužení akreditace | | Ano | 1407T020 |
| | Učitelství chemie pro střední školy - prodloužení akreditace | | 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: Analytická 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 | Analytická chemie |
| Údaje o garantovi studijního oboru | prof. RNDr. Viktor Kanický DrSc. |
| Zaměření na přípravu k výkonu regulovaného povolání | ne |
| Charakteristika studijního oboru (studijního programu) | |
| <p>Analytická chemie je interdisciplinární vědní obor zabývající se určováním chemického složení a struktury látek, využívající poznatků obecné, anorganické, organické a fyzikální chemie, biochemie, ale také fyziky, biologie, matematiky, popř. dalších vědních oborů. Analytická chemie přesahuje rámec chemie a znalostí i z jiných nechemických disciplín, zejména z fyziky, jsou např. v instrumentálních analytických metodách velmi důležité. Analytická chemie vyvíjí metody a postupy analýz makro i mikroobjektů různé povahy, včetně objektů živé přírody, buněčných i subbuněčných struktur. Zasahuje tak do všech oblastí hospodářství a lidské činnosti, včetně životního prostředí.</p> <p>Magisterský studijní obor Analytická chemie je určen pro absolventy bakalářského studia příbuzných chemických programů. Studium je zaměřeno na zvládnutí všech fyzikálních, chemických, ale i biologických principů analytických postupů a metod s cílem vychovat odborníky, kteří budou schopni v analytické praxi tvořivě aplikovat své vědomosti i na řešení úkolů, se kterými se během studia nesetkali.</p> | |
| Profil absolventa studijního oboru (studijního programu) & cíle studia | |
| <p>Cílem studijního oboru Analytická chemie je připravit odborníky s vysokou úrovní znalostí z klasických i moderních analytických metod. Základ vzdělání tvoří vědomosti z chemických disciplín: obecné a anorganické chemie, organické chemie, analytické chemie, fyzikální chemie, biochemie, z matematiky a fyziky, včetně základních praktických dovedností pro práci v laboratoři, které studenti získali v rámci svého bakalářského studia. Na tomto základě jsou rozvíjeny další prohlubující předměty studijního oboru zaměřené na klasické a moderní metody analytické chemie, na úpravu a analýzu rozmanitých materiálů podle zásad správné laboratorní praxe. Jde o předměty z oblasti organické analýzy, separačních metod, atomové spektrometrie, molekulové spektroskopie, hmotnostní spektrometrie, elektroanalytických metod, stopové analýzy, speciální analýzy, bioanalytických a klinicko diagnostických metod, chemických senzorů, chemické struktury, jaderné chemie, analýzy pevných látek, plazmové spektrometrie a laserů. Rozvíjeny jsou výpočetní technika, chemometrie, optimalizace a hodnocení analytických metod, včetně zpracování dat. Kromě teoretických vědomostí jsou prohlubovány i praktické poznatky z moderních analytických metod. Tím jsou u absolventů tohoto studijního oboru vytvořeny předpoklady na jejich uplatnění v široké oblasti působení, kde je vyžadováno odborné vzdělání na vysokoškolské úrovni orientované na analytickou chemii a pro další doktorské studium na našich nebo zahraničních univerzitách. Jsou připraveni pro práci ve výzkumu, vývoji a v analytických laboratořích. Absolventi se uplatňují jak přímo v analytických centrech, tak v analytických laboratořích hutních a strojírenských podniků, geologického průzkumu a geochemie, sklářských závodů, agrochemických podniků, v klinických laboratořích, v hygienické službě, v zemědělských laboratořích, v laboratořích veterinárních zařízení, v laboratořích potravinářského a farmaceutického průmyslu, při kontrole životního prostředí aj. Jsou připraveni nejen na profesionální působení ve své specializaci, ale také na snadnou adaptaci k případnému působení v jiném oboru.</p> | |
| Charakteristika změn od předchozí akreditace (v případě prodloužení platnosti akreditace) | |
| <p>Ve srovnání s předchozí akreditací navazujícího magisterského studijního programu Chemie, oboru Analytická chemie (s platností od 16. 2. 2006) byly v období zahrnujícím akademické roky 2006/07 až 2010/11 postupně převáděny vybrané předměty z kategorie "povinně volitelné předměty" do kategorie "povinné předměty". Jedná se o předměty C7030 Separací metody, C7031 Atomová spektrometrie, C7050 Elektroanalytické metody, C7041 Molekulová spektrometrie (vše přednášky), dále C6170 Analýza materiálů - cvičení a C6250 Metody chemického výzkumu - praktikum (v r. 2010 pod názvem Instrumentální analýza, v letech 2006 až 2009 Analytická chemie organických látek - laboratorní cvičení). Stejně jako v akreditaci 2006 je povinným předmětem C8102 Speciální metody - laboratorní cvičení. Nově byl vytvořen povinný předmět C3700 Jakost v analytické laboratoři, doporučeně volitelný předmět C7955 Molekulová luminiscence a k doporučeným volitelným předmětům byl přidán předmět C6410 Organická analýza - praktikum. Tímto opatřením bylo dosaženo sjednocení přípravy studentů ke státní závěrečné zkoušce z analytické chemie.</p> | |
| 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 | Analytická 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 Analytická chemie a dvou dalších předmětů ze skupiny Anorganická chemie, Biochemie, Fyzikální chemie, Chemie životního prostředí, Materiálová chemie a Organická 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 – povinný předmět: | | | | | |
| <u>Analytická chemie</u> | | | | | |
| <i>Analytické reakce</i> | | | | | |
| 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. | | | | | |
| <i>Gravimetrie</i> | | | | | |
| Teorie vzniku sraženin, pochody na sraženinách; vážení; zpracování sraženin, gravimetrické postupy. | | | | | |
| <i>Titrační metody</i> | | | | | |
| 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. | | | | | |
| <i>Elektroanalytické metody</i> | | | | | |
| Teoretické 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: elektrolyza, elektrolytické dělení kovů, coulometrie a coulometrické titrace. | | | | | |
| Voltamperometrie, polarografie: Polarografická analýza, adsorptivní rozpouštěcí voltamperometrie, amperometrické, biamperometrické a bipotenciometrické titrace. | | | | | |
| <i>Optické analytické metody</i> | | | | | |
| 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, kyvety 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.

Separáční metody

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

- Harris D. C.: Quantitative chemical analysis. 4th ed. New York: W. H. Freeman, 1995.
- Harris D. C.: Quantitative chemical analysis. 7th ed. New York: W. H. Freeman and Company, 2007.
- Christian G. D.: Analytical chemistry. 6th ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2003.
- Kellner R., Mermet J. M., Otto M., Widmer H. M.: Analytical Chemistry, Wiley 1998.

- Mermet J. M., Otto M. Cases, M. V.: Analytical chemistry :a modern approach to analytical science. 2nd ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2004.
- Skoog D. A., Holler, J. F., Nieman T. A.: Principles of instrumental analysis. 5th ed. Philadelphia: Saunders College Publishing, 1998.
- Skoog D. A.: Analytical chemistry : an introduction. 7th ed. Fort Worth : Saunders College Publishing, 1999.
- Sommer L.: Základy analytické chemie I, VUTium Brno 1998.
- Sommer L. a kol., Základy analytické chemie II, VUTium Brno 2000.
- Schwedt, G.: The essential guide to analytical chemistry. Translated by Brooks Haderlie. 2nd ed. Chichester: John Wiley & Sons, 1997.
- Volka K.: Analytická chemie II. VSCHT Praha 1995.
- Zýka J. a kol. : Analytická příručka. Díl I a II. SNTL Praha, 1988.
- Broekaert J. A. C.: Analytical Atomic Spectrometry with Flames and Plasmas. Copyright 2002 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA
- Eckertová L., Frank L.: Metody analýzy povrchů: Elektronová mikroskopie a difrakce, Academia Praha 1996
- Kavan L.: Metody elektronové spektroskopie, Academia, Praha 1986
- Komárek J.: Atomová absorpční spektrometrie. Masarykova univerzita v Brně, 2000.
- Král J., Frank L.: Metody analýzy povrchů: Iontové, sondové a speciální metody Academia, Praha.
- Štulík K.: Analytické separační metody, 1. vyd. Praha, Karolinum, 2004

Okruhy otázek – volitelné předměty:

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 periodicitu 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 chémie*, 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*, Wiley-Interscience, New York 1999, ISBN 0-471-19957-5..

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. Glycosidy, 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. *Biochémia*, Alfa, Bratislava 1987
- Vodrážka, Z. *Biochemie*, 2. vyd., Praha Academia, 1996.

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. 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 s reagujícími složkami. Trojsložkové fázové diagramy. Parciální molární veličiny. Gibbsova-Duhemova rovnice. Raoultův a Henryho zákon.

Termodynamika mísení. Aktivita. Kapalně roztoky. Koligativní vlastnosti. Gibbsovo fázové pravidlo. Izobarické fázové diagramy dvousložkových soustav kapalina-kapalina a kapalina-pevná látka.

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, jeho partiční funkce. Užití statistické termodynamiky.

Rovnovážná elektrochemie

Aktivita 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. Tepelná vodivost, difúze, 1. a 2. Fickův zákon.

Základy nerovnovážné termodynamiky

Produkce entropie, Vztah toků a hnacích sil. Příklady užití lineární nerovnovážné termodynamiky.

Nelineární nerovnovážná termodynamika. Oscilující reakce.

Transport iontů a kinetika přenosu elektronu

Faradayovy zákony, vodivost iontů. Specifická a molární vodivost silné a slabé elektrolyty. Kohlrauschův a Ostwaldův zákon. Převodová čísla. Elektrochemický potenciál. Přepětí a polarizace.

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 a fázové rozhraní

Osmóza. Elektroforéza. Polyelektrolyty a dialýza. Viskozita. Povrchová energie, kapilární jevy, praktické aspekty rozdělovacích rovnováh.

Koloidy a adsorpce

Struktura a stabilita povrchů. Typy disperzních soustav, elektrická dvojvrstva. Příprava a vlastnosti koloidů. Koagulace koloidů. Fyzikální a chemická adsorpce. Adsorpční isotermy.

III. Struktura

Základní pojmy kvantové mechaniky

Operátory, vlastní funkce a vlastní hodnoty. 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 dvojjatomové 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. Variační princip, poruchový počet, repulze elektronů, repulzní integrál, Hartreeova-Fockova teorie SCF. Roothanovy rovnice. p-elektronové přiblížení. Hückelova (HMO) a rozšířená Hückelova metoda (EHT). Mullikenova populační analýza. Zavedení spinu do vlnové funkce, spinorbitály, Slaterovy determinanty. Korelační energie, základy metody konfigurační interakce (CI).

Struktura molekul

Symetrie molekul. Metody studia struktury molekul. Molekulová mechanika.

Elektrické, magnetické a optické vlastnosti molekul

Dielektrika v elektrickém poli (rovnice Debyeova a Clausiova-Mossottiova). Dipólový moment molekul. Polarizace 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.: *Fyzikálno-chemické vlastnosti atomů a molekul*. SPN; Bratislava 1980
- Polák R., Zahradník R.: *Kvantová chemie*. SNTL, Praha 1985

Chemie životního prostředí

Chemie životního prostředí

Vstupy polutantů do jednotlivých složek prostředí, transport prostředím a jeho ovlivnění, transformace polutantů. Vlivy polutantů na živé organizmy 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 bifenyly, 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, Kmax Kd. 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 (organizmus 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 kapalné fázi.

Příprava materiálů v požadovaném tvaru:

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

Organická chemie

Předmět 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.

Alkany a cykloalkany, chem. názvosloví, struktura a reaktivita. Alkeny, geometrická isomerie u alkenů, adiční reakce, mechanismus a stereochemie adičních reakcí. Polymerace.

Optická aktivita a symetrie molekul. Chiralita molekul, podmínky chiralit. Optická isomerie (enantiomery), specifická rotace.

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 trojné vazby, adiční reakce (elektrofilní i nukleofilní reakce), kyselost atomů vodíku vázaných na sp-hybridní uhlík. pKa hodnoty.

Aromatický stav a jeho demonstrace (rezonanční 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 ρ a σ .

Halogenderiváty a jejich strukturní typy, rozdělení z hlediska 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.

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. Nitrosoučeniny, struktura a chem. názvosloví. Vliv nitroskupiny na uhlíkatý zbytek. Příprava nitrolátek (ambidentní ionty). Redukce nitrosoučenin v závislosti na pH. Azosoučeniny, azoxysoučeniny a hydrazolátky. Nitrily a isokyanidy, struktura a příprava. Hydrolyza nitrilů, sonitrilová zkouška. Organokovové sloučeniny, chem. názvosloví. Vliv kovu na chemické vlastnosti sloučeniny.

Základní představitelé organokovových sloučenin a jejich reaktivita a využití v organické syntéze.

Karboonylové sloučeniny. Charakterizace karbonylu, nukleofilní adice, reakce s kyslíkatými, dusíkatými a uhlíkatými nukleofily. Vliv karbonylu na uhlíkatý zbytek a využití v organické syntéze. Základní jmenné reakce s využitím karboonylových sloučenin.

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.

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. Tuhy a jejich struktura, zmydelnění. Substituční deriváty karboxylových kyselin (hydroxykyseliny-laktony, laktidy, aminokyseliny aktamy, halogenokyseliny, ketokyseliny). Deriváty kyseliny uhlíčitě, jejich klasifikace a základní typy, jejich reaktivita.

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. Heterocyklické 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, przymidin (báze nukleových kyselin), pyridazin struktura. Puriny (základní představitelé, báze nukleových kyselin). Pteriny (struktura).

Literatura:

- Mc Murry J. *Organická chemie*, překlad 6. vydání, VUTium Brno a VŠCHT Praha, 2007.
- J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers: *Organic Chemistry*, Oxford University Press, New York 2001.
- 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, 2004.
- M. Potáček: *Organická chemie pro biology*. 1. vyd. Brno : Vydavatelství Masarykovy univerzity, 1995.
- F.A. Carey, R.J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry*, Part B. New York : Plenum Press, 1990.
- 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.

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 chémia*. 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:

Elektromigrační techniky v analýze chelatajících činidel - http://is.muni.cz/th/175763/prif_m/

Hmotnostní spektrometrie klastrů a nano-materiálů - http://is.muni.cz/th/175993/prif_m/

HPLC značených oligonukleotidů - http://is.muni.cz/th/175599/prif_m/

Kapilární elektroforéza vybraných peptidů a steroidů - http://is.muni.cz/th/211142/prif_m/

Analýza metaloproteinů pomocí LC-MS - http://is.muni.cz/th/175241/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 informatických 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 předmětu Analytická chemie a dvou dalších předmětů ze skupiny Anorganická chemie, Biochemie, Fyzikální chemie, Chemie životního prostředí, Makromolekulární chemie, Materiálová chemie a Organická 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 | | | | | |
| C7000 | Oborový seminář I | 2 | 0/2 | z | Kanický |
| C7001 | Diplomová práce I | 3 | 0/0/3 | kz | vedoucí práce |
| C7030 | Separační metody | 2+2 | 2/0 | zk | Havliš |
| C7031 | Atomová spektrometrie | 2+2 | 2/0 | zk | Kanický, Otruba |
| C7050 | Elektroanalytické metody | 2+2 | 2/0 | zk | Trnková |
| C7777 | Zacházení s chemickými látkami | 0 | 0/0 | z | Příhoda |
| C8102 | Speciální metody - laboratorní cvičení | 5 | 0/0/5 | kz | Farková, Hrdlička, Lubal |
| Doporučené volitelné předměty | | | | | |
| - | Doporučené volitelné předměty | 8 | | | |
| Jarní semestr | | | | | |
| Povinné předměty | | | | | |
| C3700 | Jakost v analytické laboratoři | 3+2 | 1/2 | zk | Farková |
| C6170 | Analýza materiálů - cvičení | 5 | 0/0/5 | kz | Komárek |
| C6250 | Metody chemického výzkumu - praktikum | 5 | 0/0/5 | kz | Farková, Vrbková |
| C6950 | Chemická exkurze | 0 | 0/0 | z | Janků |
| C6960 | Odborná praxe | 0 | 0/0 | z | Koča, Pinkas, Šindelář |
| C7041 | Molekulová spektrometrie | 2+2 | 2/0 | zk | Kanický, Táborský |
| C8000 | Oborový seminář II | 2 | 0/2 | z | Kanický |
| C8001 | Diplomová práce II | 5 | 0/0/5 | kz | vedoucí práce |
| 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 | Kanický |
| 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 | Kanický |
| 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. | | | | | |

Doporučené volitelné předměty

| kód | název předmětu | kredit | rozsah | ukončení | vyučující |
|-------------------------------|---|--------|--------|----------|--|
| Podzimní semestr | | | | | |
| Doporučené volitelné předměty | | | | | |
| Bi7942 | Bioanalytika I - Biomakromolekuly | 2+2 | 2/0 | zk | Havliš |
| C5020 | Chemická struktura | 2+2 | 2/0 | zk | Brož |
| C5030 | Chemická struktura - seminář | 1 | 0/1 | z | Brož |
| 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 |
| C5241 | Analytická chemie organických látek | 1+2 | 1/0 | zk | Farková,Pazdera,Preisler |
| C5350 | Analytická chemie III | 2+2 | 2/0 | zk | Lubal,Preisler |
| C5355 | Analytická chemie III - seminář | 1 | 0/1 | z | Lubal |
| C7060 | Stopová analýza | 2+2 | 2/0 | zk | Komárek |
| C7080 | Lasery v analytické chemii | 2+2 | 2/0 | zk | Novotný,Otruba |
| C7830 | Kapilární elektroforéza | 2+2 | 2/0 | zk | Havel |
| C7895 | Hmotnostní spektrometrie biomolekul | 2+2 | 2/0 | zk | Preisler |
| C7950 | Speciační analýza | 2+2 | 2/0 | zk | Kanický,Komárek,Lubal |
| C7955 | Molekulová luminiscence | +2 | 1/0 | zk | Táborský,Preisler |
| Jarní semestr | | | | | |
| Doporučené volitelné předměty | | | | | |
| Bi7072 | Bioanalytika II - Analytické metody v klinické praxi | 2+2 | 2/0 | zk | Havliš |
| C2105 | Počítač v analytické laboratoři | 2 | 0/2 | kz | Farková,Preisler |
| C6020 | Jaderná chemie - laboratorní cvičení | 3 | 0/0/3 | kz | Křivohlávek |
| C6140 | Optimalizace a hodnocení analytických metod | 2+2 | 2/0 | zk | Farková |
| C6290 | Atomová absorpční spektrometrie | 1+2 | 1/0 | zk | Komárek |
| C6300 | Optická a hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem | 1+2 | 1/0 | zk | Kanický |
| C6410 | Organická analýza - praktikum | 3 | 0/0/3 | kz | Farková,Pazdera |
| C8820 | Metody studia rovnováh a kinetiky reakcí | 2+2 | 2/0 | zk | Havel |
| C8880 | Vybrané metody analýzy pevných látek | 1+2 | 1/0 | zk | Kanický,Otruba |

| 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). Dalším 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

Bi7072 Bioanalytika II - Analytické metody v klinické praxi

Vyučující: [doc. Mgr. Jan Havliš Dr.](#)

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

Cíle předmětu: hlavní cíle přednášky: úvod do tématu laboratorní diagnostika; na konci kurzu by studenti měli být schopni - vymezit vztah bioanalýzy a diagnostiky chorob; - zvážit a použít příslušný postup od výběru metody, přes stanovení až po vyjádření výsledku; - rozumět principům základních metodických postupů a běžných instrumentálních technik

Osnova:

- 1. úvod, vzorky - preanalytická fáze
- 2. instrumentace - analyzátoři; organizace, integrace a miniaturizace analýz
- 3. jakost v klinické analýze - kontrola a řízení
- 4. analytické metody - výběr a optimalizace
- 5. analytické soupravy; analytický výsledek - jeho vyjadřování; vybrané instrumentální metody
- 6. barevnost - fyzikální jev a jeho využití v bioanalýze; lékařská mikrobiologie
- 7. klinická imunoanalýza
- 8. klinické aspekty analýzy proteinů
- 9. klinické aspekty analýzy DNA
- 10. případová studie - vývoj metody pro klinickou diagnostiku; pufrý v bioanalytice
- 11. vybrané analyty 1 - anorganické
- 12. vybrané analyty 2 - organické a makromolekuly

Výukové metody: výuka je založena na ppt prezentaci a jejím výkladu. prezentace bude dostupná jako studijní podklad (černobílý tisknutelný pdf s vysokým rozlišením a omezenými právy). vzhledem k výkladu, jenž prezentaci významně rozšiřuje, a neexistenci vhodných učebnic v českém jazyce pokrývajících některé části přednášky je vhodné přednášku navštěvovat.

Metody hodnocení: zkouška ústní; u studentů se předpokládá pochopení a znalost základních principů a jejich využití. zkouška se sestává ze tří základních otázek, které budou postupně v průběhu zkoušení rozvíjeny, aby student mohl prokázat míru porozumění tématu.

Literatura:

- Chromý, Vratislav. *Bioanalytika : analytická chemie v laboratorní medicíně*. 1. vyd. Brno : Masarykova univerzita v Brně, 2002. 267 s. ISBN 80-210-2917-. info
- Chromý, Vratislav - Fischer, Jiří. *Analytické metody v klinické chemii*. 1. vyd. Brno : Masarykova univerzita, 2000. 215 s. ISBN 80-210-2363-5. info

Bi7942 Bioanalytika I - Biomakromolekuly

Vyučující: [doc. Mgr. Jan Havliš Dr.](#)

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

Cíle předmětu: hlavní cíle přednášky: uvedení do pojmu bioanalytika; na konci kurzu by studenti měli být schopni - porozumět postupům při analýze biomakromolekul a suprabiomolekulárních struktur (nukleové kyseliny, proteiny a jejich komplexy, lipidové struktury) se zvláštním zřetelem na využití hmotnostní spektrometrie jako všestranné analytické techniky; - osvojit si základní teoretické pozadí těchto postupů

Osnova:

- 1) analytické postupy v bioanalytice – náročnost; vysocevýkonné a nízkokrokové analýzy, standardizace
- 2) afinitní metody – princip, provedení, použití (separace, interakční studie), IMAC, APAGE
- 3) imunoanalytické metody – princip; imunoanalýza – precipitační, aglutinační, imunoeseje, metody: FIA, LIA, RIA, EIA, ELISA, IAC, IACE, SELDI...
- 4) separace biomakromolekul – gelová elektroforéza; principy, provedení (1D, 2D; polyakrylamid, agaróza); blotování; 2D kapalinová chromatografie

- 5) genomika (analýza DNA) – základy genetiky (struktura, funkce DNA), analytické postupy: PCR, restrikční enzymy; identifikace známé (hybridizace) a neznámé sekvence (Sangerova m., pyrosekvence, 454, Solexa, Solid); identifikace změn v DNA; metylace DNA a její analýza
- 6) základy hmotnostní spektrometrie – principy; ionizace (ESI – dekonvoluce spektra; MALDI), hmotnostní analýza (tandemová MS), detekce, vakuová technika; hmotnostní spektrum, základní pojmy v MS
- 7) proteomika (analýza proteinů a jejich komplexů) – základy proteomiky (struktura proteinů a proteinových komplexů, organizace proteomu)
- 8) expresní proteomika – metodika (MS: bottom-up, top-down), MS: identifikace proteinu pomocí peptidových otisků/map, bioinformatika v MS-asistované proteomice; MS: identifikace proteinu pomocí sekvence aminokyselin; další metody expresní proteomiky: 2D HPLC, 2D PAGE, 2D analýza obrazu
- 9) kvantitativní analýza proteinů – kvantifikace pomocí hmotnostní spektrometrie, vsunutí kvantitativní informace do MS spektra (metoda vnitřního standardu; hmotnostní značka – ICAT, ICMT, TMT, MCAT, GIST, SILAC, SIL), dešifrování kvantitativní informace v MS spektru; automatizace v proteomice (problémy AI)
- 10) funkční proteomika – metodika (následná a paralelní analýza), metody studia interakce protein-protein (Y2H; BiFC; mbSUS; MeRA; SEAM – značení myc, TAP, FLAG, His; využití iontové mobility); absolutní kvantifikace proteinů a peptidů pomocí MS (SIL, VICAT, QCAT; molární ionizační koeficient; pravděpodobnostní přístup)
- 11) strukturní proteomika – metodika (zesíťování molekulárními pravítky), metody (FTICR MS); shotgun proteomika – spojené techniky
- 12) analýza post-translačních modifikací – formy PTM, MS analýza PTM – lokalizace; glykosylace, fosforylace; určení rozsahu PTM
- 13) lipidomika (analýza lipidů a buněčných membrán) – základy lipidomiky (struktura funkce buněčných membrán a jejich složek), analytické postupy: extrakce lipidů, TLC, GC, LC, SFC, GPC, MS (PIS, HGS, FAS), MS analýza, shotgun analýza

Výukové metody: výuka je založena na ppt prezentaci a jejím výkladu. prezentace bude dostupná jako studijní podklad (černobílý tisknutelný pdf s vysokým rozlišením a omezenými právy). vzhledem k výkladu, jenž prezentaci významně rozšiřuje, a neexistenci vhodných učebnic v českém jazyce pokrývajících některé části přednášky je vhodné přednášku navštěvovat.

Metody hodnocení: zkouška ústní; u studentů se předpokládá pochopení a znalost základních principů a jejich využití. zkouška se sestává ze tří základních otázek, které budou postupně v průběhu zkoušení rozvíjeny, aby student mohl prokázat míru porozumění tématu.

Literatura:

- Mikkelsen, Susan R. - Cortón, Eduardo. *Bioanalytical chemistry*. Hoboken, N.J. : John Wiley & Sons, 2004. xvii, 361. ISBN 0-471-54447-7. info
- *Posttranslational modifications of proteins :tools for functional proteomics*. Edited by Christoph Kannicht. Totowa, N.J. : Humana Press, 2002. xi, 322 s. ISBN 0-89603-678-2. info
- Liebler, Daniel C. *Introduction to proteomics :tools for the new biology*. Edited by John R. Yates. Totowa, NJ : Humana Press, 2002. ix, 198 s. ISBN 0-89603-992-7. info
- *Foundations of Comparative Genomics*. Edited by Arcady R. Mushegian. I. Title. Burlington, USA : Elsevier Academic Press, 2007. 265 s. ISBN 0120887940. info
- *Quantitative proteomics by mass spectrometry*. Edited by Salvatore Sechi. Totowa, N.J. : Humana Press, 2007. x, 218 p. ISBN 978-1-58829-571. info
- Benfey, Philip N. - Protopapas, Alex D. *Essentials of genomics*. Upper Saddle River, N.J. : Prentice-Hall, 2005. xiv, 346 p. ISBN 0-13-047018-X. info

CA000 Oborový seminář IV

Vyučující: [prof. RNDr. Viktor Kanický DrSc.](#)

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:

- 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)

C2105 Počítač v analytické laboratoři

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

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

Cíle předmětu: Student se seznámí s využitím počítače pro získávání, zpracování a prezentaci dat. Cílem je zvýšení počítačové gramotnosti; získané vědomosti a dovednosti jsou nutným předpokladem pro další studium, dokončení bakalářské práce i pro praxi.

Osnova:

- 1. Úvod. Využití programu MS Excel pro zpracování dat 2. ORIGIN - software pro vizualizaci dat, tvorbu grafů a analýzu dat 3. Statistický software (např. STATISTICA, Statgraphics, ADSTAT) 4. QC Expert - software pro statistické řízení jakosti a statistickou analýzu dat 5. Využití matematicky orientovaného software v chemii (např. Matlab, Maple) 6. Rozhraní přístroj - počítač, vstup a výstup dat 7. Základy programování (textové a grafické programovací jazyky) 8. PC jako virtuální instrument - LabView 9. Softwarové nástroje pro prezentaci dat (např. MS Word, MS PowerPoint, ADOBE Acrobat) 10. Nástroje pro práci s internetem (www a ftp servery, tvorba webových stránek) 11. Zabezpečení počítače (hardwarové i softwarové) 12. Další možnosti využití počítačů v analytické laboratoři (např. MathType, Isis Draw)

Výukové metody: Přednášky

Metody hodnocení: Závěrečná ústní zkouška

Literatura:

- Handouts provided by teacher during the course

C3700 Jakost v analytické laboratoři

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

Rozsah: 1/2/0. 3 kr. (plus ukončení). Ukončení: zk.

Cíle předmětu: Cílem kurzu je seznámit studenty se způsoby vyjadřování jakosti, jejího sledování a řízení.

Osnova:

- 1. základy statistiky 2. testování hypotéz, ANOVA 3. zásady správného měření 4. chemická metrologie 5. kalibrace 6. referenční materiály 7. validace analytických metod 8. vzorkování 9. nejistoty 10. návaznost chemických měření 11. jakost a její řízení 12. regulační diagramy 13. vnitřní kontrola laboratoře, mezilaboratorní zkoušky

Výukové metody: Typ výuky: přednášky, diskuse v hodině, teorie je probírána v přímé spojitosti s praktickými příklady, praktické úlohy jsou řešeny na PC

Metody hodnocení: Typ zkoušky: písemná zkouška, ústní zkouška, samostatné práce ve cvičení

Literatura:

- Suchánek, Miroslav - Plzák, Zbyněk - Šubrt, Pavel - Koruna, Ivan. *KVALIMETRIE 7. Validace analytických metod*. Praha : EURACHEM-ČR, 1997. 137 s. ISBN 80-901868-2-3. 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 absorpční vlnové délky 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 multiplietů, počet NMR signálů a symetrie molekuly, intenzita signálů 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. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

Cíle předmětu: Praktické výpočty k jednotlivým temátům 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 schopeni 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 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. (příf 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, aktivací energie, parametr štěpení. Větvené přeměny. Odrzová 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. Přírozená 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 dozimetry, 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 γ 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 ozáření, 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 ozářených 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

C5120 Počítače v chemii a chemometrii

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 chemometrii - cvičení

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

Rozsah: 0/2/0. 2 kr. (příf 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. (příp 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. *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
- 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
- Stuzka, 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

C5350 Analytická chemie III

Vyučující: [doc. RNDr. Přemysl Lubal Ph.D.](#), [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 bude během kursu složeného z jednotlivých uzavřených přednášek seznámen s moderními pokročilými analytickými technikami. Kurs je nadstavbou k základním přednáškám Analytická chemie I (C3100) a Analytická chemie II (C4050). V přednášce je také poukázáno na současné trendy v analytické chemii (vývoj instrumentace, metodologie). Je zdůrazněn interdisciplinární charakter současné analytické chemie. Přednáška je dokumentována četnými příklady převzatými z literatury nebo z praxe. Na základě získaných informací pak student bude schopen pochopit její základní principy moderní analytické chemie. Analýzou problémů s využitím svých dosažených znalostí pak bude navrhovat jeho řešení.

Osnova:

- 1. Kinetické metody chemické analýzy. Teoretické základy - opakování základních pojmů a jejich využití. Instrumentace a jejich využití pro stanovení.
- 2. Moderní chemometrické metody v analytické chemii. Využití chemometrických algoritmů, aplikace počítačů v analytické chemii. Příklady optimalizace analytických metod. Soft-modeling metody.
- 3. Chemická analýza v jiných než vodných prostředích. Titrace ve směsných a nevodných prostředích, dvoufázová titrace. Využití tenzidů v analytické chemii.
- 4. Analytické metody s využitím radioizotopů. Základní pojmy. Dělení metod. Popis jednotlivých metod a jejich využití v praxi. Aktivační analýza.
- 5-6. Kombinované "hyphenated" techniky, miniaturizace, automatizace v analytické chemii.
- 7-8. Pokročilé optické metody a jejich využití v analytické chemii. Laserová analytická spektroskopie - Vlastnosti a druhy laserů. Analytická interakce laserového záření s hmotou. Lineární metody - příklady optoakustická, LIF spektroskopie, aj. Nelineární metody. Speciální metody - detekce stopových množství, časově rozlišená spektroskopie, LIDARová dálková detekce.
- 9. Přehled instrumentálních metod vhodných pro organickou analýzu (Ramanova, IR, NMR spektroskopie, MS spektrometrie, polarimetrie, spektropolarimetrie a CD spektrometrie, refraktometrie a interferometrie) a příklady použití.
- 10. Moderní separační metody. Prekoncentrace vzorku - Solid Phase Extraction (SPE). Membránové separace - ultrafiltrace, dialýza, elektrodialýza, reverzní osmóza. Metody využívající SF skupenství - extrakce, chromatografie. FFF metody.
- 11-12. Analýza povrchů. Laserová ablace. Techniky s fotonovou sondou (PES, XPS, UPS, LAMMS, aj.). Techniky s elektronovou sondou (EPXMA, SEM, kombinovaná AEM, AES, aj.). Techniky s iontovou sondou (RBS, ISS, SIMS, aj.). Techniky s pólovou sondou (FIM, aj.). Mikroskopie se snímací sondou (STM, AFM, aj.). Analytická rentgenová spektrometrie a její využití v strukturální analýze.

Výukové metody: teoretická příprava

Metody hodnocení: Znalosti získané na přednášce jsou prověřovány kombinovanou zkouškou (písemná a ústní část).

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
- Sommer L., *Základy analytické chemie II*, VUTium Brno 2000.
- Harris, Daniel C. *Quantitative chemical analysis*. 7th ed. New York : W. H. Freeman and Company, 2007. 1 sv. (rů. ISBN 0-7167-7694-4. info
- *Analytical chemistry : a modern approach to analytical science*. Edited by Jean-Michel Mermet - Matthias Otto - Miguel Valcárcel Cases. 2nd ed. Weinheim : Wiley-VCH, 2004. xxviii, 11. ISBN 3-527-30590-4. info
- Schwedt, Georg. *The essential guide to analytical chemistry*. Translated by Brooks Haderlie. 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 1997. xii, 248 s. ISBN 0-471-97412-9. info

- Aktuální publikace pro dané odvětví (Talanta, Analytica Chimica Acta, Fresenius Journal of Analytical Chemistry, Analytical Chemistry, aj.)

C5355 Analytická chemie III - seminář

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

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

Cíle předmětu: Předmět je vyučován jako doplňkový k předmětu Analytická chemie III (C5355). Je vysoce žádoucí souběžné absolvování předmětu Počítače v chemii a chemometrie (C5120 a C5140). Cílem předmětu je pochopit současné trendy moderní analytické chemie.

Osnova:

- viz Analytická chemie III (C5355)

Výukové metody: seminář

Metody hodnocení: Znalostí získané v semináři jsou prověřovány závěrečným písemným testem (splnění na 70 %).

Literatura:

- Kellner R., Mermet J.-M., Otto M., Widmer H. M., Analytical Chemistry, Wiley 1998.

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 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 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

C6140 Optimalizace a hodnocení analytických metod

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

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

Cíle předmětu: Cílem předmětu je seznámit studenty se způsoby hodnocení a optimalizace analytických metod.

Osnova:

- 1. Pojem a postavení chemické analýzy. 2. Analytický systém. 3. Analytický signál. 4. Základní pojmy analytické metrologie signálu a výsledku. 5. Analytická metoda. 6. Praktické použití metrologických charakteristik při uvádění analytických výsledků. 7. Metrologické vlastnosti analytické metody a analytického systému. 8. Vývoj analytické metody. 9. Referenční materiály v analytické chemii. 10. Nejistoty. 11. Řízení kvality a akreditace laboratoře. 12. Validace

Výukové metody: Typ výuky: přednášky, diskuse v hodině, teorie je probírána v přímé spojitosti s praktickými příklady, praktické úlohy jsou řešeny na PC

Metody hodnocení: Typ zkoušky: písemná zkouška, ústní zkouška, samostatné práce

Literatura:

- Pytela, Oldřich. *Optimalizace*. 1. vyd. Pardubice : Vysoká škola chemicko-technologická, 1982. 115 s. info

C6170 Analýza materiálů - cvičení

Vyučující: [prof. RNDr. Josef Komárek DrSc.](#)

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

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: - porozumět analýze vzorků vod, silikátů, kovů, slitin, půd a biologických materiálů - propojit teoretické znalosti a získané praktické zkušenosti - experimentovat a vyvíjet postupy - kombinovat různé praktické postupy - zhodnotit praktické možnosti rozkladů vzorků

Osnova:

- 1. Analýza vod. Stanovení pH, CHSKMn, ZNK, KNK, rozpuštěných látek.
- 2. Stanovení chloridů, síranů a fosforečnanů.
- 3. Stanovení a) dusitanů, vápníku a hořčíku b) amoniakálního dusíku nebo fluoridů.
- 4. a) Stanovení arsenu HGAAS b) Stanovení rtuti CVAAS.
- 5. Analýza kovů a slitin. Analýza technického železa - stanovení chromu a manganu.
- 6. Analýza hliníkové slitiny - stanovení mědi nebo železa.
- 7. Analýza silikátů. Rozklad vzorku, stanovení SiO₂.
- 8. Stanovení hliníku, vápníku a hořčíku.
- 9. Stanovení železa a titanu.
- 10. Analýza půd - stanovení fosforu.
- 11. Analýza biologického materiálu. a) Nízkoteplotní suchý rozklad - stanovení vápníku v obilkách. b) Vysokoteplotní suchý rozklad - stanovení chromu v mouce.
- 12. a) Mokrý rozklad v otevřeném systému - stanovení zinku ve vlasech. b) Mokrý rozklad v autoklávu - stanovení vápníku v mléce.

Výukové metody: Výuka je realizována formou laboratorních cvičení. Důraz je kladen na učení se novým dovednostem při praktické analýze vod, silikátů, kovů, slitin, půd a biologických materiálů.

Metody hodnocení: Závěrečné hodnocení (na konci semestru) je provedeno formou klasifikovaného zápočtu. Hodnocení je na základě provedení úloh, výsledků, zpracování protokolů a písemného testu teoretických znalostí.

Literatura:

- Horáková, Marta - Lischke, Peter - Grünwald, Alexander. *Chemické a fyzikální metody analýzy vod*. 2. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1989. 389 s. 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 Dubskeho. 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 kadmennatého, 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

C6290 Atomová absorpční spektrometrie

Vyučující: [prof. RNDr. Josef Komárek DrSc.](#)

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

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: - porozumět problémům v atomové absorpční spektrometrii (AAS) - charakterizovat parametry důležité pro měření v AAS - zvolit systém eliminace interferencí a korekce pozadí - porovnat možnosti plamenové AAS, AAS s elektrotermickou atomizací a AAS s generováním těkavých sloučenin - ocenit výhody atomové absorpční spektrometrie - navrhnout vhodný postup pro praktické aplikace

Osnova:

1. Základní principy, atomová spektra, šířka čáry, rezonanční čára.
2. Přístroje, zdroje záření, lampy s dutou katodou, bezelektrodové výbojky.
3. Spektrální interference.
4. Korekce pozadí pomocí kontinuálního zdroje záření.
5. Korekce pozadí s využitím Zeemanova jevu a metoda Smith-Hieftje.
6. Plameny, hořáky, zmlžovače, vzorkovací lodička, Delvesův kelímek, STAT, FIA.
7. Atomizace v plameni, zmlžování, vypařování, chemické reakce.
8. Interference transportu, vypařování a v plynné fázi. Eliminace vlivů.
9. Elektrotermické atomizátory, elektrografit, pyrolytický grafit, wolfram.
10. Konstrukce elektrotermických atomizátorů, WETA, platformová a sondová technika.
11. Elektrotermická atomizace, mechanismy, interference.
12. Modifikátory matrice, vliv organických rozpouštědel.
13. Generování těkavých hydridů, atomizace, interference.
14. Generování studených par rtuti.

Výukové metody: Výuka je realizována formou přednášek s prezentací v Powerpointu. Důraz je kladen na porozumění základním principům atomové absorpční spektrometrie, atomizaci v atomizátorech, rušivým vlivům, jejich eliminaci, korekci pozadí a využití v praktické analýze.

Metody hodnocení: Závěrečné hodnocení (na konci semestru) je provedeno formou ústní zkoušky. Ta spočívá ve čtyřech otázkách, které vyžadují popis a vysvětlení dotazovaného problému.

Literatura:

- Komárek, Josef. *Atomová absorpční spektrometrie*. Brno : Masarykova univerzita v Brně, 2000. 85 s. ISBN 80-210-2500-X. info
- Welz B., Sperling M.: *Atomabsorptionsspektrometrie*. Wiley-VCH, Weinheim 1997.
- Hassan, Saad S. M. *Organic analysis using atomic absorption spectrometry*. Chichester : Ellis Horwood Limited, 1984. 384 s. ISBN 0-85312-559-7. info

C6300 Optická a hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem

Vyučující: [prof. RNDr. Viktor Kanický DrSc.](#)

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

Cíle předmětu: Po absolvování přednášky získá student informace o principech, instrumentaci, vlastostech a praktickém použití optické a hmotnostní spektrometrie v indukčně vázaném plazmovém výboji (ICP-AES, ICP-MS). Seznámí se s procesy v plazmatu důležitými pro spektrochemickou analýzu, se zaváděním vzorku do výboje, s optimalizací analytické techniky. K tomu mu poslouží výklad o součástech instrumentace, dějích při tvorbě aerosolu, procesech v plazmatu, generování analytického signálu a jeho selektivitě, zpracování a detekci, a to v následujícím výčtu pojmů: vysokofrekvenční generátory, plazmové hlavice, ionizační a excitační mechanismy, prostorové rozdělení intenzity emise, koncentrace ekvivalentní pozadí, laterální a axiální pozorování ICP; zavádění vzorku do výboje, zmlžování roztoků, technika generování hydridů, vnášení pevných vzorků, elektrotermická vaporizace, jiskrová a laserová ablace, odpařování v el. oblouku; emisní spektrometry, monochromátory, polychromátory, echelle spektrometry s plošnými polovodičovými detektory, aplikace v analýze materiálů, trendy vývoje plazmové spektrometrie; hmotnostní spektrometrie s ICP zdrojem, instrumentace ICP-MS, spektrální a nespektrální interference v ICP-MS. Na základě informací získaných absolvováním tohoto předmětu bude student umět po praktickém seznámení s instrumentací vyvinout analytickou metodu pro daný typ vzorku, provádět rutinní analýzy i výzkum.

Osnova:

- 1. Úloha a význam plazmové spektrometrie v analytické chemii; princip a fyzikální vlastnosti indukčně vázaného plazmatu (ICP); ICP jako zdroj pro atomovou emisní spektrometrii (AES), atomizační prostředí pro fluorescenční spektrometrii (AFS) a zdroj iontů pro hmotnostní spektrometrii (MS); plazmové hlavice, generátory ICP; přehled zavádění vzorku do ICP. 2. Teploty a termodynamická rovnováha v ICP, excitační a ionizační mechanismy; ICP-AES, atomová a molekulová spektra v ICP, intenzita spektrální čáry, normovaná teplota, "hard" a "soft" spektrální čáry; analytický signál a pozadí, koncentrace ekvivalentní pozadí, standardní odchylka signálu, standardní odchylka pozadí, mez detekce, mez stanovení; analytické vlastnosti ICP-AES, analytické vlastnosti ICP-MS 3. Axiální, radiální a laterální rozdělení intenzity emise ve výboji ICP, emisivita, oblasti ICP výboje; multiplikativní (nespektrální) interference snadno ionizovatelných prvků, multiplikativní (nespektrální) interference kyselin; vliv frekvence generátoru, příkonu do plazmatu, průtoku plynů a výšky pozorování a rychlosti čerpání vzorku na prostorové rozdělení emise, nespektrálních interferencí a mezí detekce; eliminace nespektrálních interferencí volbou robustních podmínek ICP, kompenzace nespektrálních interferencí pomocí porovnávacího prvku; laterální a axiální pozorování výboje - možnosti a omezení. 4. Původ a klasifikace spektrálních interferencí, selektivita; spektrometr, jeho disperze, rozlišení a rozlišovací schopnost, vliv rozlišovací schopnosti spektrálního přístroje na poměr signálu k pozadí a na velikost spektrálních interferencí; vliv spektrálních interferencí a jejich korekce na přesnost a správnost měření, mez detekce a stanovitelnosti v reálných vzorcích; vliv pracovních podmínek zdroje na velikost spektrálních interferencí; algoritmy korekcí spektrálních interferencí; spektrální atlasy. 5. Šum a jeho zdroje v ICP-AES, výstřelový šum, blikavý šum; šum pozadí, šum signálu, přesnost měření, vliv integrační doby na přesnost měření, vliv velikosti signálu na přesnost měření; přesnost, opakovatelnost (krátkodobá, dlouhodobá), mezilehlá opakovatelnost; reprodukovatelnost; drift přístroje, zdroje driftu a jejich eliminace, kompenzace driftu pomocí různých metod s využitím porovnávacích prvků. 6. Kalibrace ICP-AES, linearita kalibračních závislostí, volba modelu, vliv počtu a rozdělení kalibračních vzorků, pásy spolehlivosti; kalibrace při analýze roztoků, příprava kalibračních roztoků; metoda standardního přídatku. 7. Zavádění roztoků do ICP; pneumatické zmlžovače (koncentrický, úhlový, Babingtonův, žlábkový, síťkový, fritový); ultrazvukový zmlžovač, zmlžovač s přímým vstříkáváním, termosprej, vyskotlaký hydraulický zmlžovač; tvorba, modifikace a transport aerosolu, vlastnosti zmlžovačů, vlhký a suchý aerosol; elektrotermické vypařování do ICP. 8. Zavádění pevných vzorků do ICP; práškové a kompaktní vzorky, vodivé a nevodivé vzorky; zmlžování suspenzí, elektrotermická vaporizace; přímé zavádění pevného vzorku (DSID - direct sample insertion device, SET - sample elevator technique); elektroabraz (ablace) elektrickou jiskrou, obloukem; laserová ablace. 9. Zavádění plyných vzorků do ICP; generování těkavých hydridů, ostatní těkavé sloučeniny; "on-line" spojení ICP se separačními technikami; speciální analýza s ICP s hmotnostní spektrometrií a separačními technikami. 10. Metodika měření s ICP-AES, příprava roztoků, určení optimálních podmínek měření, měření při malých a velkých poměrech signál/pozadí, korekce pozadí, korekce spektrálních interferencí, kontrola korekčních faktorů, nejvyšší stanovitelný obsah, normalizace výsledků na celkový obsah při stanovení úplného složení. 11. Diagnostika ICP-AES, poměr intenzit atomové a iontové čáry Mg jako kritérium "robustnosti" ICP, kontrola zmlžování, kontrola přenosu energie do plazmatu, kontrola stavu optického systému, metodika měření, regulační diagram, analýza kontrolního vzorku; obvyklé problémy při měření s ICP. 12. Příprava vzorků a rozklady vzorků pro ICP spektrometrii s analýzou roztoků, příklady metod tavení vzorků a rozpouštění v kyselinách, příčiny systematických chyb při

rozkladech; příprava vzorků pro přímou analýzu pevných vzorků s ICP; omezení v přípravě vzorků při použití ICP s hmotnostní spektrometrií. 13. Přehled aplikací ICP-AES a ICP-MS v analýze technických materiálů, surovin, v geologických vědách, v analýze environmentálních vzorků, potravin, biologických a klinických materiálů. 14. Zdroje a vyjádření nejistot při stanovení ICP spektrometrií; hodnocení analytických výsledků. 15. Současný stav a perspektivy plazmové spektrometrie; rozvoj instrumentace, nové excitační zdroje, miniaturizace.

Výukové metody: přednáška

Metody hodnocení: Ústní zkouška.

Literatura:

- 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
- Taylor, Howard E. *Inductively coupled plasma-mass spectrometry :practices and techniques*. San Diego : Academic Press, 2001. xi, 294 s. ISBN 0-12-683865-8. info
- *Inductively coupled plasmas in analytical atomic spectrometry*. Edited by Akbar Montaser - D. W. Golightly. 2nd ed. Hoboken, N.J. : Wiley-VCH, 1992. xxii, 1017. ISBN 0-471-18811-5. info
- *Inductively coupled plasma mass spectrometry handbook*. Edited by Simon M. Nelms. 1st pub. Oxford : Blackwell Publishing, 2005. xv, 485 s. ISBN 1-4051-0916-5. info

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

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: [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#), [prof. RNDr. Jiří Pinkas Ph.D.](#), [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: [prof. RNDr. Viktor Kanický DrSc.](#)

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)

C7030 Separační metody

Vyučující: [doc. Mgr. Jan Havliš Dr.](#)

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

Cíle předmětu: hlavní cíle přednášky: úvod do analytických separačních metod; osvojení si jejich principů; seznámení se s širší jejich současného praktického provedení a využití; vymezení pojmů separace při přípravě vzorku, separace analytická a preparativní; volba a optimalizace separačního systému, vyhodnocením jeho účinnosti, validací separační metody a vyhodnocením výsledků separace

Osnova:

- 1. úvod; extrakce: popis extrakčních rovnováh v systému kapalina-kapalina a v systému kapalina-pevná látka; volba extrakčního systému, provedení extrakce, vliv interakcí analyt-rozpouštědlo, opakovaná extrakce
- 2. předanalytická příprava vzorku: SFE (extrakce nadkritickými tekutinami); ASE (urychlená extrakce rozpouštědlem); MAE (extrakce pomocí mikrovlnného záření), TLC (chromatografie na tenké vrstvě, HPTLC, 2D TLC), SPE (extrakce na pevné fázi), SPME (mikroextrakce na pevné fázi); HSE (extrakce z plynné fáze)
- 3. analytická separace: kapalinová chromatografie (LC) – historie, teoretické základy; klasifikace základních separačních mechanismů v LC (LLC, LSC, IC, GPC), fyzikálně-chemický popis procesů LC, přenos hmoty v LC, termodynamické aspekty separace; kinetické aspekty separace
- 4. uspořádání LC: doprava mobilní fáze, eluce a eluční síla (izokratická, gradientová eluce); dávkovací zařízení; separační kolona, typy stacionárních fází (částicové, monolitické, on-chip), přehled sorbentů, detektory (fotometrické (DAD), refraktometrické, fluorescenční, amperometrické, vodivostní, detektor rozptylu světla, hmotnostně spektrometrické detektory),
- 5. popis a vyhodnocení výsledků separace: definice chromatografického systému, analytická informace z chromatogramu (kvalitativní, kvantitativní); přesnost, správnost, limity analýzy (MDL, LOD, LOQ); vyhodnocení účinnosti separace, testování systému a jeho „dobré“ chování; základní módy kapalinové chromatografie: NP-HPLC (chromatografie na normální fázi), RP-HPLC (chromatografie na obrácené fázi), ultravýkonná kapalinová chromatografie, kapalinová chromatografie za zvýšené teploty, ultravýkonná kapalinová chromatografie za zvýšené teploty, HILIC (kapalinová chromatografie s hydrofilními interakcemi), HIC (kapalinová chromatografie s hydrofobními interakcemi)
- 6. IEC (iontově výměnná chromatografie) – principy a provedení; chromatofokuzace; afinitní chromatografie – principy, IMAC (afinitní chromatografie s imobilizovaným iontem kovu); SFC (chromatografie nadkritickými tekutinami); PC (perfuční chromatografie)
- 7. vícerozměrná chromatografie; spojené techniky; preparativní chromatografie – principy a provedení, vývoj chromatografické metody, kritéria výběru a optimalizace separačního systému; zkoumání a popis reálné separace; kvantitativní vztahy mezi strukturou a selektivitou vzhledem k retenci; chirální separace: definice chiralit; optická rotační disperze;
- 8. zobrazení chiralit, chirální selektory, chirální stacionární fáze a jejich aplikace v separačních metodách (HPLC); separace makromolekul: historie, teoretické základy – popis makromolekuly, molekulová hmotnost; módy separace makromolekul – GPC (molekulová vylučovací chromatografie)
- 9. provedení GPC – kolony, detektory (rozptyl světla), HC (hydrodynamická chromatografie), FFF (frakcionace tokem v poli) – principy, instrumentace, módy (SdFFF, ThFFF, EFFF, FFFF); plynová chromatografie (GC) – historie, teoretické základy (izotermy, stlačitelnost plynu, retenční veličiny)
- 10. uspořádání GC, doprava mobilní fáze; dávkovací zařízení (s děličem toku, bez děliče toku); separační kolona, typy stacionárních fází (WCOT, FSOT, SCOT, PLOT), detektory (plamenově ionizační, chemiluminiscenční, hmotnostně spektrometrické detektory, atd.). elektromigrační metody, historie a teorie, iontová mobilita, elektroosmotický tok
- 11. elektromigrační metody – popis separace, účinnost a faktory ji ovlivňující (teplo, difúze, disperze); instrumentace – dávkování, zdroje napětí, separační prostředí (kapilára, membrána, gel, čip), detektory (fotometrické, laserem indukovaná fluorescence, vodivostní detekce, hmotnostní spektrometrie atp.); preparativní módy; definice elektroforetického systému a analytické informace z elektroforetogramu; základní módy elektromigračních metod – kapilární zónová elektroforéza (CZE), kapilární gelová elektroforéza (CGE)
- 12. plošná gelová elektroforéza (GE), kapilární izoelektrická fokuzace (CIEF), kapilární izotachoforéza (CITF), micelární elektrokinetická chromatografie, tenkovrstvá elektrochromatografie, kapilární elektrochromatografie; afinitní a nevodná elektroforéza; validace analytické separační metody; proč a jak, základní pojmy – shodnost metody, přesnost metody, kalibrace, selektivita, robustnost

Výukové metody: výuka je založena na ppt prezentaci a jejím výkladu. prezentace bude dostupná jako studijní podklad (černobílý tisknutelný pdf s vysokým rozlišením a omezenými právy). vzhledem k výkladu, jenž

prezentaci významně rozšiřuje, a neexistenci vhodných učebnic v českém jazyce pokrývajících některé části přednášky je vhodné přednášku navštěvovat.

Metody hodnocení: zkouška ústní; u studentů se předpokládá pochopení a znalost základních principů a jejich využití. zkouška se sestává ze tří základních otázek, které budou postupně v průběhu zkoušení rozvíjeny, aby student mohl prokázat míru porozumění tématu.

Literatura:

- Churáček, Jaroslav. *Úvod do vysokoučinné kapalinové kolonové chromatografie*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1984. 188 s. info
- Štulík, Karel. *Analytické separační metody*. 1. vyd. Praha : Karolinum, 2004. 264 s. ISBN 80-246-0852-9. info
- Dolník, Vladislav. *Úvod do kapilární elektroforézy*. 1994. info

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 emisi 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 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, Bouguer-Lamber-Beerův zákon v AAS. Atomizátory v AAS (plameny, elektrotermické atomizátory. Spektrální rušení, neselektivní absorpce záření, příčiny a metody korekce. Neselektrální 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 neselektrální 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 vlnově 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 Tábořský Ph.D.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř 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 pásů, 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. (příf 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 laboratoře základního a aplikovaného výzkumu.

Osnova:

- 1. Úvod - krátký historický přehled, literatura. Elektroanalytická metoda, použité elektrické veličiny, základní pojmy (elektrochemický článek, elektroda, elektroodový děj, elektroaktivní částice, migrace, difúze, konvekce, stacionární děj, elektrochemický potenciál). Přenos elektronu, Fermiho energetická hladina. Klasifikace elektroanalytických metod. 2. Potenciometrie. Potenciál, elektromotorická síla (EMS), elektroodový potenciál, Nernstova rovnice, význam standardního potenciálu, způsoby měření EMS, pH- a pX-metry, indikační elektrody a referenční 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. Elektrolyza. 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 elektrolyza. 6. Coulometrie. Princip metody, srovnání coulometrie a elektrogravimetrie, Faradayovy zákony, elektrochemický ekvivalent, rozdělení coulometrických metod podle pracovního režimu, stanovení počtu přenášených 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 adsorpční rozpouštěcí voltamperometrie. Proces reverzibilní (Randles-Ševčíkova rovnice) a ireverzibilní (Delahayova rovnice). Chronopotenciometrie a chronoamperometrie. 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 nádobky, 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*

C7060 Stopová analýza

Vyučující: [prof. RNDr. Josef Komárek DrSc.](#)

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 problémům stopové analýzy - zvolit systém práce v laboratoři pro stopovou analýzu - charakterizovat parametry důležité pro prostředí čisté laboratoře - porovnat možnosti metod pro zkoncentrování stopových prvků a separaci matrice - ocenit výhody průtokové analýzy - navrhnout vhodný postup a metodu pro praktické aplikace

Osnova:

- 1. Specifické problémy práce s malým množstvím vzorku. Mikroanalýza, ultramikroanalýza, převod z makroměřítka do mikroměřítka, homogenita vzorku, mikrosonda. Mikrogravimetrie, srážení, filtrace, sušení, žihání, mikroelektrogravimetrie. Mikrotitrace, odměrné baňky, mikropipety, mikrobyrety, titrační nádoby.
- 2. Potenciometrická, konduktometrická a amperometrická mikrotitrace. Mikrofotometrie, průtoková mikrokyveta. Mikrometrie, sedimentace, Mikroanalytické váhy, mikrováhy. Elektromagnetické váhy, mikrováhy s křemenným rezonátorem.
- 3. Význam stopové analýzy pro praxi. Stopový obsah, částice v atmosféře a laboratoři, čištění prostoru. Laboratoř pro stopovou analýzu, požadavky na ni, její vybavení a provoz. Jiné možnosti snížení kontaminace ovzduším.
- 4. Chemické nádobí, materiál, kontaminace a ztráty, čištění, materiál pro úpravu vzorků. Činidla, způsoby čištění a přípravy či-nidel potřebné čistoty, jejich uchovávání, příprava čisté vody, označení kvality činidel.
- 5. Problémy stopové analýzy a jejich vliv na výsledek. Odběr reprezentativního vzorku, homogenita materiálu. Stabilita vzorku a jeho uchovávání. Kontaminace a ztráty analytu během analytického postupu.
- 6. Rozklady anorganických vzorků. Autoklávy s teflonovou a křemenou nádobkou. Rozklad v plynné fázi, v kapalně fázi s destilací kyseliny uvnitř autoklávu, hetero-genní rozklad.
- 7. Rozklady biologických materiálů. Rozklad na mokré cestě minerálními kyselinami, vztah k obsahu uhlíku, rozklady za normálního a vysokého tlaku. Autoklávy. Ohřev konvenční a mikrovlnou energií. Mikrovlnné rozkladné systémy za normálního a vysokého tlaku. UV-fotolýza. Nízkoteplotní rozklad mokrou cestou (Fentonovo činidlo).
- 8. Vysokoteplotní suché spalování, klasická a mikrovlnná muflová pec, rozklad v přítomnosti kyslíku za normálního tlaku a v uzavřeném systému. Mineralizátor Apion. Nízkoteplotní spalování, radiofrekvenční plazma. Sušení vzorku, tradiční, IR zářením a mikrovlnou energií.
- 9. Obohacovací techniky ve stopové analýze. Separace mikrokomponenty od makrokomponenty a naopak. Metody destilační, destilace stopových prvků z roztoků, pevných a kapalných vzorků, vypařování matrice z roztoků, pevných a kapalných vzorků.
- 10. Selektivní rozpouštění stopových prvků a matrice. Extrakce kapalina-kapalina, dávková, kontinuální, zpětná, extrakce chelátů a iontových asociátů, extrakce stopových prvků a matrice. Třífázová a homogenní extrakce. Sorpce, iontová výměna. Iontoměniče, chelatační sorbenty, polyuretanová pěna, aktivní uhlí.
- 11. Průtoková analýza, segmentovaný tok, FIA. Disperze, dávkovací jednotky, konstrukce FIA systémů. Měření pH, ISE, ředění vzorků. Prekoncentrace na sorbentech a FIA systémy. Kapalinová extrakce ve FIA, segmentor, separátor fází.

- 12. Vymrazování a zonální tavení. Srážení prvků matrice, srážení stopových prvků, nosné srážení a flotace. Iontová flotace.
- 13. Elektrochemická depozice na pevných elektrodách, statické a průtokové uspořádání, kombinace s emisní spektrální analýzou, ET-AAS. Vylučování stopových prvků na rtuťové elektrodě, samovolná elektrochemická depozice. Slepý pokus a jeho význam, logaritmicko-normální rozdělení, mez detekce.
- 14. Metody analýzy povrchů a tenkých vrstev. Spektrometrie s doutnavým výbojem v Grimmově výbojce, laserová ablace, LA-ICP-OES.
- 15. Stopová analýza organických látek. Derivatizační postupy, reaktory, použití, technika uhlíkového skeletu. Analýza "head space". Plynová chromatografie-hmotová spektrometrie, použití. Infračervená reflexní spektroskopie s mikrozrcátkem, ATR infračervená spektroskopie. Analýza na velké vzdálenosti.

Výukové metody: Výuka je realizována formou přednášek s prezentací v PowerPointu. Důraz je kladen na porozumění řešení problémů stopové analýzy, metodám zkoncentrování a průtokové analýzy, vyhodnocení dat a využití v praktické analýze.

Metody hodnocení: Závěrečné hodnocení (na konci semestru) je provedeno formou ústní zkoušky. Ta spočívá v šesti otázkách, které vyžadují popis a vysvětlení dotazovaného problému.

Literatura:

- *Trace metal analysis and speciation.* Edited by I. S. Krull. Amsterdam : Elsevier, 1991. 302 s. ISBN 0-444-88209-. info
- Mizuike, Atsushi. *Metody koncentrování mikroelementů v neoorganické analýze : Enrichment techniques for inorganic trace analysis (Orig.) : Enrichment techniques for inorganic trace analysis (Orig.).* Moskva : Chimija, 1986. 151 s. info
- Beyermann, Klaus. *Organic Trace Analysis.* Chichester : Ellis Horwood Limited, 1984. 365 s. ISBN 0-85312-638-0. info
- Dulski T.R.: Trace elemental analysis of metals. Methods and Techniques. 1999.

C7080 Lasery v analytické chemii

Vyučující: [Mgr. Karel Novotný Ph.D.](#), [prof. RNDr. Vítězslav Otruba CSc.](#)

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

Cíle předmětu: Principy laserů a jejich aplikace v chemické analýze materiálů, životního prostředí a řízení a kontrole technologických procesů, základním a kosmickém výzkumu.

Osnova:

- 1. Principy laserové techniky: Einsteinovy zákony pro emisi a absorpci záření, pojem koherence záření, inverzní populace, metastabilní stavy atomů a molekul, aktivní prostředí.
- 2. Zesilovač a generátor záření. Optická zpětná vazba, rezonátory, módy, kvalita Q, pojem Q-modulace. Modulace aktivní a pasivní, synchronizace módů, femtosekundové oscilátory.
- 3. Aktivní prostředí laserů: Plynové lasery (He-Ne.), energetické diagramy; molekulové CO₂, N₂, HCN lasery; lasery v pevné fázi (rubínový a Nd-YAG), optické čerpání, pulsní a kontinuální provoz; iontové lasery (Ar); excimerové lasery (KrF); polovodičové lasery (GaAs, CdHgSeTe); chemické lasery (HF).
- 4. Plynule laditelné lasery barvivové (Rhodamin), pevnolátkové (Safir:Ti), frekvenční a spektrální vlastnosti, konstrukce jednomódových laditelných laserů. Pulsní lasery, koherence a frekvenční spektrum záření krátkých impulsů.
- 5. Výkonové parametry laserů: Kontinuální, šum a stabilita; Pulzní výkon, délka pulsů, stabilita.
- 6. Laserové záření a optické vlastnosti materiálů, průchod elmag. záření hmotným prostředím, nelineární optika; absorpce záření v povrchových vrstvách pevných materiálů.
- 7. Analytické aplikace s využitím vysoké koncentrace energie v paprsku: Laserová ablace pro povrchovou a lokální analýzu materiálů v kombinaci s dalšími spektrálními metodikami (AAS, ICP, OES); laserová jiskra v emisní spektrometrii, MALDI.
- 8. Laserová spektrometrie nenasycených stavů: atomová fluorescence fotoionizace (jedno- a dvoufotonová) a její analytické aplikace (LEI), Ramanova spektrometrie, absorpční spektrometrie UV-VIS-IR s vysokým rozlišením, optoakustická spektrometrie, absorpční spektrometrie nízkých absorbancí.
- 9. Laserová spektrometrie nasycených stavů (saturační spektrometrie) bezdopplerovská absorpční spektrometrie jedno- a dvoufotonová, frekvenční standardy, absorpční spektrometrie vysokých absorbancí, heterodynní spektrometrie.

- 10. Detekce jednotlivých atomů a molekul, prostorová orientace molekul v pevné fázi, prostorová strukturní analýza v nanotechnologiích a biologii.
- 11. Analýza vzdálených objektů pomocí LIDARu: analýza plynných emisí, smogu, bojových plynů. Analýza nebezpečných vzorků na dálku: spektrální analýza radioaktivního odpadu, vzorků za vysokých teplot (pece, reaktory), nedostupných (stožáry, vrty).
- 12. Dálkový průzkum Země a zemské atmosféry (heterodynní nelineární spektrometrie, analýza gravitačního pole).

Výukové metody: teoretická příprava

Metody hodnocení: přednáška, ústní zkouška

Literatura:

- Hábovčík, Peter. *Lasery a fotodetektory*. 1. vyd. Bratislava : Alfa, vydavateľstvo technickej a ekonomickej literatúry, 1990. 318 s. ISBN 80-05-00526-1. info
- Letochov, Vladilen Stepanovič. *Lazernaja fotoionizacionnaja spektroskopija*. Moskva : Nauka, 1987. 320 s. info
- Engst, Pavel - Horák, Milan. *Aplikace laserů*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1989. 204 s. info
- Žarov, Vladimír Pavlovič - Letochov, Vladilen Stepanovič. *Lazernaja optiko-akustičeskaja spektroskopija*. Moskva : Nauka, 1984. 319 s. info

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. (ru. ISBN 80-86229-08-4. info
- <http://www.rect.muni.cz/nso/>

C7830 Kapilární elektroforéza

Vyučující: [prof. RNDr. Josef Havel DrSc.](#)

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

Cíle předmětu: Separační metody hrají významnou roli nejen v analytické chemii ale i ve všech ostatních oblastech chemie, v chemické či biochemické technologii a ve farmacii. Kapilární elektroforéza je moderní separační metodou a jednou z neúčinnějších separačních technik vůbec. Její nespornou výhodou kromě vysoké účinnosti je malá spotřeba vzorku a možnost separace i velmi podobných látek a i různých typů izomerů včetně látek chirálních. Hlavním cílem kurzu je studentům vysvětlit základy této elektromigrační techniky tak, aby byli schopni na základě nabytých znalostí tuto techniku racionálně používat v praxi a hlavně ji umět aplikovat i na v literatuře dosud nepopsané případy separací a stanovení látek anorganických, organických, farmak a léčiv a

také ji používat v jiných oborech - biologických, medicinských a technologických. Součástí kursu jsou proto také praktická cvičení a řešení problémů na počítači a simulačních programech vybavených databázemi látek, jejich konstant, atd. což dovoluje studenty učit myslet. Kurs je také doplněn základními postupy vývoje elektroforetických metod a jejich optimalisace včetně použití kombinace plánování pokusů a aplikace umělých neuronových sítí.

Osnova:

- Historie vývoje, podstata elektromigrace Zařazení kapilární elektroforézy do separačních metod Základní módy elektroforézy Základní pojmy: iontová pohyblivost, efektivní pohyblivost Výpočty iontové a efekt. pohyblivosti, jejich stanovení Elektroosmotický tok, podstata. Sternova vrstva, Zeta potenciál Možnosti měření elektroosmotického toku Modifikace EOF různými technikami Základy instrumentace, schema přístroje, rozměry kapilár, detekční okénko Technické detaily, pokryté a nepokryté kapiláry DETEKTORY a detekční technika v CE Uv Vis, DAD, potenciometrie, vodivost, MS a LIF Spojení CE a MS ev, CE a MALDI Metody dávkování vzorků v CE. Hydrodynamické a elektrokinetické, rozdíly. Základní elektrolyt v CE, změny pH, druhy elektrolytů Disperse v CE, základní faktory Ohmův zákon, vliv teploty, eliminace Elektrokinetická micelární chromatografie, principy a separace neutrálních látek Chemické rovnováhy a kinetika v CE Vliv chemických reakcí na separaci, komplexace a její využití Chirální separace, chirální selektory, možnosti ovlivnění APLIKACE CE v různých oblastech, stručný přehled OPTIMALISACE v CE a základní možnosti jejího provedení Jednofaktorové pokusy, multivariační přístupy a umělé neuronové sítě. Možnosti dalšího vývoje, chipová elektroforéza.

Výukové metody: Přednášky a demonstrace separačních procesů a cvičení na počítači.

Metody hodnocení: Písemná zkouška doplněná ústním pohovorem

Literatura:

- Jandik, Petr - Bonn, Günther. *Capillary electrophoresis of small molecules and ions*. New York : VCH Publishers, 1993. 298 s. ISBN 1-56081-533-7. info
- Kuhn, Reinhard - Hoffstetter-Kuhn, Sabrina. *Capillary electrophoresis : principles and practice*. Berlin : Springer-Verlag, 1993. x, 375 s. ISBN 3-540-56434-9-. info
- Chankvetadze, Bezhana. *Capillary electrophoresis in chiral analysis*. Chichester : John Wiley & Sons, 1997. xiii, 555. ISBN 0-471-97415-3. info
- *Affinity capillary electrophoresis in pharmaceuticals and biopharmaceuticals*. Edited by Reinhard H. H. Neubert - Hans-Hermann Rüttinger. New York : Marcel Dekker, 2003. xi, 362 s. ISBN 0-8247-0951-9. info
- Kuhn, Reinhard - Hoffstetter-Kuhn, Sabrina. *Capillary electrophoresis : principles and practice*. Berlin : Springer-Verlag, 1993. x, 375 s. ISBN 0-387-56434-9. info
- Schwartz, Herb. *Separation of proteins and peptides by Capillary Electrophoresis: Application to Analytical Biotechnology*. : Beckman Coulter, 1993. 119 s. info
- *Capillary electrophoresis in analytical biotechnology*. Edited by Pier Giorgio Righetti. Boca Raton : CRC Press, 1996. 551 s. ISBN 0-8493-7825-7. info
- Li, Sam F. Y. *Capillary electrophoresis : principles, practice and applications*. Amsterdam : Elsevier, 1993. 582 s. ISBN 0-444-81590-2. info
- *Capillary electrophoresis of proteins and peptides*. Edited by Mark A. Strege - Avinash L. Lagu. Totowa, N.J. : Humana Press, 2004. xi, 332 s. ISBN 1-58829-017-4. info
- *Capillary electrophoresis of nucleic acids*. Edited by Keith R. Mitchelson - Jing Cheng. Totowa, N.J. : Humana Press, 2001. xx, 408 s. ISBN 0-89603-765-7. info

C7895 Hmotnostní spektrometrie biomolekul

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

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

Cíle předmětu: Student získá základy hmotnostní spektrometrie: ionizační metody, hmotnostní analyzátoři, 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 analyzátoři. 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

C7950 Speciační analýza

Vyučující: [prof. RNDr. Viktor Kanický DrSc.](#), [prof. RNDr. Josef Komárek DrSc.](#), [doc. RNDr. Přemysl Lubal Ph.D.](#)

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

Cíle předmětu: Na konci tohoto kursu bude student schopen porozumět následujícím metodám, vysvětlit jejich principy a získat představu o jejich praktickém použití. Speciační analýza je metoda identifikace a stanovení různých chemických forem určitého prvku v roztocích a pevných vzorcích nebo určení jeho prostorového rozložení v pevných látkách. U daného prvku lze rozlišit formy jako jsou oxidační stavy, organokovové sloučeniny a komplexy, a dále jednotlivé podíly vázané na různé fáze systému (např. v půdách), na skupiny sloučenin (bílkoviny, polysacharidy) a na biologické struktury (orgány, biomembrány, buňky). Toxické i prospěšné účinky prvků závisejí na biologických, fyzikálních a chemických vlastnostech jejich sloučenin specií, které jsou nositelem informace o biodostupnosti příslušného kovu a metaloidu. Chemické, biologické a toxikologické vlastnosti prvku v závislosti na jeho formě mají dopad do mnoha oblastí, jako jsou: hodnocení rizik v životním prostředí; ekotoxikologie; potravinářský průmysl; hygiena a zdraví v pracovním prostředí; klinická chemie a medicína; průmyslová analýza. Speciační analýza pro stanovení chemických forem prvků v roztocích a extraktech z pevných vzorků představuje soubor tandemových technik založených na on-line spojení separační techniky s vysokým rozlišením s prvkově specifickou detekcí. Specie v roztocích se uskutečňuje také s využitím elektrochemických technik, biosensory a radioanalytických metod. Specie prostorového rozložení je založena na použití sondy využívající interakce úzkého směrového paprsku částic (fotonů nebo iontů) s pevným vzorkem. Na základě nabytých znalostí bude student schopen vybrat vhodnou analytickou metodu pro provedení konkrétní speciační analýzy v daném vzorku.

Osnova:

- 1. Úvod do speciace. Odběr, zpracování a uchování environmentálních, klinických a potravinových vzorků. Zacházení se vzorky pro speciační analýzu biologických materiálů. Techniky přípravy vzorku pro studium prvkové speciace. Příprava vzorku pro frakcionaci prvku v environmentálních vzorcích: sedimentech, půdách, aerosolech a poléťavém popílku. 2. Separální techniky ve speciační analýze. Chromatografie: kapalinová chromatografie s obrácenými fázemi, chromatografie iontových párů, iontová chromatografie, vylučovací (gelová) chromatografie, plynová chromatografie, kapilární zónová elektroforéza a gelová elektroforéza. 3. Techniky detekce I. Selektivní techniky atomové optické spektrometrie: atomová absorpční spektrometrie (AAS), atomová emisní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem (ICP-OES), OES v mikrovlnných plazmatech, atomová fluorescenční spektroskopie (AFS). 4. Techniky detekce II. Selektivní techniky hmotnostní spektrometrie: hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem (ICP-MS), plazmová spektrometrie s průletovým hmotnostním analyzátořem (TOFMS), ICP-MS s vysokou rozlišovací schopností, ESI-MS (hmotnostní spektrometrie s ionizační elektrosprejem). 5. Techniky speciace využívající jiné principy než atomovou optickou a hmotnostní spektroskopii: elektrochemické metody speciace, biosensory pro monitorování kovových iontů, radioanalytické metody, perspektivy vývoje instrumentace pro speciaci. 6. Specie prvků I: Al, , Au, Cd, Cr, Co, Cu, Fe, Hg, Mn, Mo, Ni, Pb, Pt, Rh. 7. Specie prvků II: As, Sb, Se, Si, Sn, Tl, V, Zn, aktinoidy, S, halogeny. Těkavé organokovové sloučeniny biogenního původu, komplexy kovů s huminovými kyselinami, komplexy kovů s proteiny. 8. Modelování speciace prvků. Teoretický základ pro modelování chemických dějů v roztocích. Použití termodynamických a kinetických dat pro modelování. Termodynamické databáze. 9. Experimentální metody pro stanovení rovnovážných

koncentrací různých forem prvků. Numerické metody pro výpočet rovnovážných koncentrací a jejich aplikace pro výpočet speciace za rovnovážných a nerovnovážných podmínek. 10. Modelování speciace prvků v životním prostředí. Modelování speciace prvků ve výživě. Modelování speciace prvků v klinické chemii a medicíně. Demonstrace software pro výpočty. 11. Kalibrace ve speciální analýze, semikvantitativní speciace, (certifikované) referenční materiály. Biodostupnost specií, hodnocení environmentálních rizik, legislativa. 12. Přímá speciace v pevných látkách: absorpční spektroskopie jemné struktury v oblasti rentgenového spektra, elektronová spektroskopie. Vybrané techniky speciace prostorového rozložení: elektronová mikrosonda (EPXMA), rentgenová spektrometrie sekundární emise s úplným odrazem (TRXRF), optická a hmotnostní spektrometrie s doutnavým výbojem (GD-OES, GD-MS), laserová ablace (LA) s ICP-MS a ICP-OES, spektroskopie laser indukovaného mikroplazmatu (LIPS, LIBS).

Výukové metody: přednáška

Metody hodnocení: přednáška, písemný test

Literatura:

- *Handbook of elemental speciation :techniques and methodology.* Edited by Rita Cornelis. Chichester : Wiley, 2003. xii, 657 s. ISBN 0-471-49214-0. info
- *Handbook of elemental speciation II. Species in the Environment, Food, Medicine and Occupational Health techniques and methodology.* Edited by Rita Cornelis. West Sussex, England : Wiley, 2005.
- *Modelling in aquatic chemistry.* Edited by Bert Allard - Ingmar Grenthe - Ignasi Puigdomenech. Paris : OECD - Organization for economic co-operation and development, 1997. liii, 724. ISBN 92-64-15569-4. info
- Stumm, Werner - Morgan, James J. *Aquatic chemistry : chemical equilibria and rates in natural waters.* New York : John Wiley & Sons, 1995. xvi, 1022. ISBN 0-471-51184-6-. info
- Pitter, Pavel. *Hydrochemie [Pitter, 1999].* 3. přeprac. vyd. Praha : Vydavatelství VŠCHT, 1999. 568 s. ISBN 80-03-00525-62. info
- Szpunar, Joanna - Łobiński, Ryszard. *Hyphenated techniques in speciation analysis.* Cambridge : Royal Society of Chemistry, 2003. xvi, 220 s. ISBN 0-85404-545-7. info

C7955 Molekulová luminiscence

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

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

Cíle předmětu: Kurs poskytne informace o fyzikálních principech molekulové luminiscence a o jejích aplikacích v anorganické, organické a zejména biochemické analýze. Na konci kurzu by studenti měli porozmět také moderním aplikacím jako jsou GFP (zeleně fluoreskující protein), FRET, FLIM, fluorescenční polarizace, FISH ("fluorescence in situ hybridization"), atd.

Osnova:

- 1. Úvod do optických metod, zařazení, historie. Absorpce světla molekulou, typy elektronových přechodů, Franck-Condonův princip. Jablonského diagram, luminiscence, fluorescence, fosforescence, zpožděná luminiscence, základní pojmy a principy. Vliv prostředí na luminiscenci, vliv pH, polarity a další. Zhášení luminiscence, dynamické a statické srážky. 2. Základní veličiny, luminiscenční spektra: excitační a emisní spektrum, Stokesův posun, zrcadlové pravidlo. Rozptyl. Základní vztahy, energetický a kvantový výtěžek, stanovení výtěžku luminiscence. Vyhasínání luminiscence. 3. Struktura látek a luminiscence, luminiscence organických molekul, typy luminiscenčních přechodů, obecná pravidla. Fluorescenční spektra biomolekul. Luminiscence anorganických látek. Luminiscence pevné fáze. Interpretace informací z luminiscenčních měření: koncentrace, struktura. Přirozená (vnitřní) a vnější luminiscence. 4. Instrumentace, fluorimetr a spektrofluorimetr, základní uspořádání přístrojů, zdroje excitace, monochromátory a detektory. 5. Měření a zpracování dat, 3D spektra, synchronní sken. Měření časově rozlišené luminiscence. Fluorescenční mikroskop. Měření fosforescence. Polarizace, luminiscenční anisotropie. 6. Rozdělení metod podle excitace: chemiluminiscence, bioluminiscence, elektroluminiscence, triboluminiscence a další. Přenos excitační energie, FRET, měření mezimolekulárních vzdáleností, BRET. Metody založené na zhášení luminiscence 7. Luminiscenční značky, derivatizace luminoforem, vazebná místa, kriteria pro výběr vhodné luminiscenční značky, luminiscenční stanovení v klinické diagnostice, fluorescenční imunoseje, fluorogenní substráty. 8. Srovnání se spektrofotometrií v oblasti UV-Vis. Spojení separačních technik s luminiscenční detekcí, single molecule detection, nepřímé stanovení. Sekvenátory DNA. 9. Luminiscenční sondy, sondy pro určení polarity prostředí, membránové sondy, sondy pro NK, fluorescenční indikátory, senzory. 10. Fluorescenční mikroskopie a časově rozlišená fluorescenční mikroskopie, průtoková cytometrie. FISH.

Fluorescenční korelační spektroskopie. 11. nativní luminiscence proteinů a peptidů, proteinové modifikace, GFP. 12. Exkurze

Výukové metody: teoretická příprava

Metody hodnocení: Finální ústní zkouška (v češtině nebo angličtině). / Lectures, final oral examination.

Literatura:

- *Principles of fluorescence spectroscopy*. Edited by Joseph R. Lakowicz. 3rd ed. New York : Springer, 2006. xxvi, 954. ISBN 0387312781. info

C8000 Oborový seminář II

Vyučující: [prof. RNDr. Viktor Kanický DrSc.](#)

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 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)

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, izotachofórzeza, 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, Hedestranda 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 přídávku, 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 parafínem impregnované uhlíkové elektrodě PIGE jsou sledovány redukce a oxidace vybraných depolarizátorů, výhody EV pro elektroanalýzu, srovnání procesů na kapalných a pevných elektrodách, 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 čary 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 abalce. 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 : kapalinná 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 kapalinné 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

C8820 Metody studia rovnováh a kinetiky reakcí

Vyučující: [prof. RNDr. Josef Havel DrSc.](#)

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

Cíle předmětu: At the end of the course students should be able to: understand and explain importance and problems of chemical equilibria and kinetics studies for chemistry; understand basic principals of numerical methods used to solve mass balance equations and principals of differential equations integration for solving chemical kinetics; to apply information on chemical equilibria in order to formulate database of e.g. equilibrium constants for computation of distribution diagrams by suitable programs; use of calculated distribution diagrams to solve problems concerning e.g. complexation of metal ions in aqueous solutions; propose reasonable and rational proposals fro complexation of selected compounds; On the base of knowledge gained be able to propose experiments to solve unknown szstems; to obtain skills fro basic interpretation of chemical equilibria data and data of chemical kinetics and via data analysis to estimate fundamental reactions in studied processes;

Osnova:

- Základní pojmy: chemický potenciál, termodynamické veličiny, odvození Guldberg-Waagova zákona, termodynamická rovnovážná konstanta, podmíněná, vliv iontové síly.
- Rovnice hmotové bilance; řešení pro výpočty rovnovážných koncentrací komponent, základy numerických metod řešení transcendentních rovnic. Distribuční diagramy. programy COGS, Haltafall, Hydra aj. Praktické ukázky. Práce s databází konstant protonačních a komplexních rovnováh. Obecná regrese a optimalisační programy, podstata programu LETAGROP a přehled jiných vyspělých programů typu SQUAD, Hyperquad aj. Princip "hledání" chemického modelu. Aplikace neuronových sítí. Chemická kinetika- základní pojmy. Diferenciální rovnice a způsoby jejich řešení. Podstata programů KILET, SPECFIT a jejich aplikace pro řešení chemické kinetiky. Hledání kinetického modelu. Možnost použití umělých neuronových sítí.

Výukové metody: Přednášky a ilustrované řešení příkladů na počítačích.

Metody hodnocení: Průběžné řešení příkladů na počítači studenty. Závěrečný písemný test.

Literatura:

povinná literatura

- Havel, Josef - Hoegfeldt, Erik - Meloun, Milan. *Computation of Solution Equilibria: A Guide to Methods in Potentiometry, Extraction, and Spectrophotometry*. 1988. ISBN 0-470-20975-5. info

doporučená literatura

- Kotrlý, Stanislav - Šůcha, Ladislav. *Chemické rovnováhy v analytické chemii : tabulky a diagramy*. Vyd. 1. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 386 s. info
- Šůcha, Ladislav - Kotrlý, Stanislav. *Teoretické základy analytické chemie*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1971. 328 s. info

C8880 Vybrané metody analýzy pevných látek

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

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

Cíle předmětu: Hlavním cílem kurzu je seznámit studenty s instrumentálními analytickými technikami a metodikami pro přímou anorganickou analýzu pevných látek

Osnova:

1. Oblouková a jiskrová spektrometrie s fotoelektrickou a fotografickou detekcí, kvalitativní analýza, vyhodnocení emisních spekter.
2. Indukčně vázané plazma pro optickou emisní a hmotnostní spektrometrii (ICP-OES a ICP-MS).
3. Laserová ablace a emisní optická spektrometrie s laserovou jiskrou (LIBS) pro lokální mikroanalýzu.
4. Základy hmotnostní spektrometrie s iontovou mikrosondou (SIMS).
5. Doutnavý výboj v analýze povrchů - Grimmova výbojka pro optickou emisní a hmotnostní spektrometrii.
6. RTG spektrometrie, vznik primárního a fluorescenčního záření, absorpční RTG spektrometrie.
7. Energodisperzní a vlnově disperzní RTG fluorescenční spektrometrie, aplikace.
8. RTG spektrometrie s buzením záření elektrony (mikrosonda, rastrovací elektronový mikroskop) a ionty (PIXE).
9. Elektronová spektrometrie ESCA, spektrometrie Augerových elektronů.

Výukové metody: teoretická příprava

Metody hodnocení: přednáška, ústní zkouška

Literatura:

- Andrews, David L. *Lasers in chemistry*. 3rd ed. Berlin : Springer-Verlag, 1997. 232 s. ISBN 3-540-61982-83. info
- Cremers, David A. - Radziemski, Leon J. *Handbook of laser-induced breakdown spectroscopy*. Chichester : John Wiley & Sons, 2006. xviii, 283. ISBN 0-470-09299-8. info
- *Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) : fundamentals and applications*. Edited by Andrzej W. Miziolek - V. Palleschi - Israel Schechter. New York : Cambridge University Press, 2006. xvii, 620. ISBN 0-521-85274-9. info
- Andrews, David L. *Lasers in chemistry*. 3rd ed. Berlin : Springer-Verlag, 1997. 232 s. ISBN 3-540-51777-4. info

C9000 Oborový seminář III

Vyučující: [prof. RNDr. Viktor Kanický DrSc.](#)

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)

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)