

MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA



ŽÁDOST O AKREDITACI

Navazujícího magisterského studijního programu

C h e m i e

Obor

F y z i k á l n í c h e m i e

Brno, říjen 2011

OBSAH

OBSAH.....	1
A – Žádost o akreditaci / rozšíření nebo prodloužení doby platnosti akreditace bakalářského / magisterského stud. programu	3
Obor: Fyzikální chemie.....	4
B – Charakteristika studijního programu a jeho oborů, pokud se na obory člení.....	4
C – Pravidla pro vytváření studijních plánů SP (oboru) a návrh témat prací	6
C1- Doporučený studijní plán	16
E – Personální zabezpečení studijního programu (studijního oboru) – souhrnné údaje.....	22
F – Související vědecká, výzkumná, vývojová, umělecká a další tvůrčí činnost	23
I – Uskutečňování akreditovaného stud. programu mimo sídlo vysoké školy	24
D – Charakteristika studijních předmětů.....	25
CA000 Oborový seminář IV	25
CA001 Diplomová práce IV	25
C5020 Chemická struktura.....	25
C5030 Chemická struktura - seminář.....	26
C5040 Jaderná chemie	27
C5060 Metody chemického výzkumu.....	29
C5120 Počítače v chemii a chemometrie	30
C5140 Počítače v chemii a chemometrie - cvičení	30
C5300 Statistická termodynamika	30
C5305 Computational Thermodynamics	31
C5320 Fyzikálně chemické základy NMR.....	32
C5340 Nerovnovážné systémy.....	33
C5440 Separční metody	34
C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie	35
C5870 EPR spektroskopie.....	35
C5880 Základy stereochemie.....	36
C5885 Základy stereochemie - seminář	37
C5900 Hmotnostní spektrometrie	37
C5910 Chromatografické metody I.....	38
C6010 Toxikologie	39
C6020 Jaderná chemie - laboratorní cvičení	40
C6170 Analýza materiálů - cvičení.....	41
C6250 Metody chemického výzkumu - praktikum	41
C6290 Atomová absorpční spektrometrie.....	42
C6300 Optická a hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem	43
C6310 Symetrie molekul.....	44
C6320 Chemická kinetika	44
C6330 Chemická kinetika - seminář	45
C6410 Organická analýza - praktikum.....	46
C6730 Fázové rovnováhy	46
C6740 Elektrické vlastnosti molekul	47
C6750 Materiálová chemie kovů	47
C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules	48
C6790 Hmotnostní spektrometrie	49
C6800 Multinukleární NMR spektroskopie.....	49
C6815 Struktura a vlastnosti polymerů.....	51
C6830 Radioekologie.....	51
C6850 Chromatografické metody II	52
C6860 Moderní metody analýzy organických polutantů	53
C6950 Chemická exkurze	54
C6960 Odborná praxe	54
C7000 Oborový seminář I.....	54
C7001 Diplomová práce I.....	55
C7031 Atomová spektrometrie	55
C7050 Elektroanalytické metody.....	56
C7280 Elektroodová kinetika.....	57
C7410 Struktura a reaktivita	58

C7670 Izotopové metody	59
C7680 Izotopové metody - laboratorní cvičení	59
C7700 Chemie nekovů	60
C7777 Zacházení s chemickými látkami	61
C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I	61
C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení	62
C7895 Hmotnostní spektrometrie biomolekul	62
C7995 Advanced Methods of Biomolecular NMR	63
C7999 Advanced Methods of NMR Spectroscopy	63
C8000 Oborový seminář II	64
C8001 Diplomová práce II	64
C8102 Speciální metody - laboratorní cvičení	65
C8400 Kvantová chemie pevných látek, výpočty elektronové struktury	66
C8500 Mechanismy organických reakcí	67
C8510 Mechanismy organických reakcí - seminář	68
C8700 Technologie chemických výrob	68
C8780 Organic Photochemistry	69
C8800 Rtg strukturní analýza	70
C8810 Chemie přechodných prvků	70
C8820 Metody studia rovnováh a kinetiky reakcí	71
C8845 Modelování chemických systémů v roztocích	72
C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II	72
C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení	73
C8880 Vybrané metody analýzy pevných látek	73
C8950 NMR - Strukturní analýza	74
C9000 Oborový seminář III	75
C9001 Diplomová práce III	75
C9530 Strukturní biochemie	75
C9920 Úvod do kvantové chemie	76
C9930 Metody kvantové chemie	77
F7460 Fyzika pevných látek pro nefyzikální obory	77
GE081 Základy geochemie	78
JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška	78

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	Fyzikální chemie – prodloužení akreditace	Ano	1404T001	
Obory v jiných dokumentech	Analytická chemie – prodloužení akreditace	Ano	1403T001	
	Anorganická chemie – prodloužení akreditace	Ano	1401T002	
	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: Fyzikální 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	Fyzikální chemie
Údaje o garantovi studijního oboru	doc. RNDr. Pavel Brož Ph.D.
Zaměření na přípravu k výkonu regulovaného povolání	ne
Charakteristika studijního oboru (studijního programu)	
<p>Fyzikální chemie zavádí a vyvíjí principy, použitelné pro objasňování a interpretaci pozorování, prováděných ve všech oblastech a specializacích klasické chemie včetně environmentální, jaderné a rovněž i v dalších hraničních oblastech jako například biochemie, biofyzika a molekulární biologie. Fyzikální chemie se zabývá studiem vlastností souborů molekul metodami klasické a statistické termodynamiky, používá spektroskopických metod k objasňování struktury jednotlivých atomů a molekul a analyzuje rychlost a mechanismus chemických reakcí. Hlavní úsilí výzkumu i výuky fyzikální chemie se soustřeďuje na termodynamiku, kvantovou chemii, chemickou strukturu, elektrochemii, chemickou kinetiku, povrchové jevy, spektroskopické metody (NMR, EPR, IR, MS), fázové a chemické rovnováhy a nerovnovážné soustavy. Trvalý kontakt s vývojem fyziky a používání matematických metod činí z fyzikální chemie nezbytný základ znalostí každého chemika jak při syntéze nových látek, tak při analýze jejich složení a vlastností.</p>	
Profil absolventa studijního oboru (studijního programu) & cíle studia	
<p>Cílem studijního oboru Fyzikální chemie je připravit absolventy s hlubokými teoretickými znalostmi jak z klasické (rovnováha, změna stavu) tak i z moderní (struktura molekul, kvantová chemie) fyzikální chemie. Základ vzdělání v tomto oboru tvoří vědomosti ze základních chemických, fyzikálních a matematických disciplín: obecné a anorganické chemie, organické chemie, analytické chemie, biochemie, fyzikální chemie, matematiky a fyziky, ale i ze speciálních fyzikálně chemických disciplín: chemické kinetiky, elektrochemie, symetrie molekul, statistické termodynamiky, nerovnovážných soustav a fyzikálně chemických metod studia struktury molekul (NMR, EPR, IR, NIR, UV/VIS, MS). Tato příprava vytváří nejen teoretický základ pro další studium absolventů v praxi, ale vybavuje absolventy též praktickými dovednostmi z oblasti výpočetní techniky, zpracování dat a získávání dat z databází. Na tomto základě jsou rozvíjeny další prohlubující předměty studijního oboru: biofyzikální chemie, elektrochemie a elektrodová kinetika, aplikovaná termodynamika, kvantová organická chemie, iniciace polymerních reakcí, termodynamika fázových rovnováh, elektrické vlastnosti molekul, materiálová chemie kovů a slitin, molekulová dynamika, fyzikálně organická chemometrie, chemická reaktivita a strukturní analýza biomolekul. V posledních čtyřech semestrech studia je umožněno studentům hlouběji se specializovat podle zvoleného zaměření diplomové práce. Studenti si při tom prohloubí své praktické dovednosti z výše uvedených oborů včetně využívání výpočetní techniky. O výsledcích své práce jsou schopni sepsat zprávu a výsledky přednést na odborném fóru a to i s použitím moderní počítačové techniky presentace. Celkově je absolvent schopen komplexního přístupu k řešení chemického problému. Tím jsou vytvořeny předpoklady pro uplatnění absolventů tohoto studijního oboru v široké oblasti profesí, kde je vyžadováno odborné vzdělání na vysokoškolské úrovni orientované na fyzikálně chemické základy analytických a syntetických chemických procesů. Poskytované vzdělání umožňuje flexibilní zapojení absolventů ve všech oborech činnosti, kde se využívají fyzikálně chemické metody výzkumu a výroby. Jsou to zejména chemický, farmaceutický a potravinářský průmysl, kontrolní laboratoře v průmyslu, laboratoře v ochraně životního prostředí, ve zdravotnictví a zemědělství, projekce a různé komerční instituce. Vzhledem k širokému pojetí odbornosti jsou absolventi připraveni nejen na profesionální působení ve své specializaci, ale také na snadnou adaptaci k případnému působení v jiném oboru a pro další navazující doktorské studium na našich nebo zahraničních univerzitách.</p>	
Charakteristika změn od předchozí akreditace (v případě prodloužení platnosti akreditace)	

Drobné úpravy v nabídce povinně volitelných a doporučených předmětů, posun ke kvantové a materiálové chemii. Po stránce vybavení rozvoj elektrochemických metod a instalace nové instrumentace pro charakteristiku nanočástic.

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	Fyzikální 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 Fyzikální chemie a dvou dalších předmětů ze skupiny Analytická chemie, Anorganická chemie, Biochemie, 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>Fyzikální chemie</u>					
<i>I. Rovnováha</i>					
<i>Termodynamika</i>					
<p>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.</p> <p>Termodynamická reverzibilita. Enthalpie, tepelné kapacity za konstantního tlaku a objemu. Termochemie. Hessův zákon. Kirchhoffova rovnice. Jouleův-Thomsonův jev. Kalorimetrie.</p> <p>Druhá věta termodynamiky. Entropie. Clausiova nerovnost. Účinnost tepelného stroje. Třetí věta. Gibbsova a Helmholtzova funkce. Gibbsova-Helmholtzova rovnice. Maximální práce. Slučovací Gibbsova funkce. Závislost Gibbsovy funkce na tlaku, teplotě a složení. Chemický potenciál. Fugacita.</p> <p><i>Fázové rovnováhy</i></p> <p>Fázové přeměny čisté látky. Obecná podmínka fázové rovnováhy. Závislost chemického potenciálu čisté látky na teplotě a tlaku. Stabilita fází. Fázový diagram. Clapeyronova a Clausiova-Clapeyronova rovnice. Klasifikace fázových přechodů. Soustavy reagujících složek. Trojsložkové fázové diagramy.</p> <p>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. Metody výpočtu fázových rovnováh.</p> <p><i>Chemické rovnováhy</i></p> <p>Závislost Gibbsovy funkce na rozsahu reakce. Rovnovážná konstanta a její závislost na tlaku a na teplotě. Le Chatelierův princip.</p> <p><i>Základní pojmy statistické termodynamiky</i></p> <p>Konfigurace a její váha, Boltzmannovo rozdělení, molekulární partiční funkce a její vztah k vnitřní energii a entropii. Kanonický soubor a jeho partiční funkce. Translační, rotační, vibrační a elektronický příspěvek k rozdělovací funkci. Užití statistické termodynamiky.</p> <p><i>Rovnovážná elektrochemie</i></p> <p>Aktivity iontů v roztocích. Debyeova-Hückelova teorie silných elektrolytů, iontová atmosféra, iontová síla. Součinné rozpustnosti. Galvanické a elektrolytické články. Standardní potenciál elektrody, redoxní schopnost. Druhy elektrod. Nernstova rovnice. Oxidačně-redukční potenciály. Kapalinové spojení a membránový potenciál. Termodynamika elektrochemického článku. pH a jeho měření.</p>					

II. Pohyb

Kinetická teorie ideálního plynu

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

Základy nerovnovážné termodynamiky

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

Transport iontů a kinetika přenosu elektronu

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

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

Praktické aspekty elektrochemie

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

Chemická dynamika

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

Vlastnosti makromolekul, koloidů a fázové rozhraní

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

III. Struktura

Základní pojmy kvantové mechaniky

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

Elektronová struktura atomů

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

Elektronová struktura molekul a metody jejího výpočtu

Bornova-Oppenheimerova aproximace. Křivka potenciální energie 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. Teorie krystalového a ligandového pole. Variační princip, poruchový počet, repulze elektronů, repulzní integrál, Hartreeova - Fockova teorie SCF. Roothanovy rovnice. p - elektronové přiblížení. Hückelova metoda (HMO) a rozšířená Hückelova metoda (EHT). Mullikenova populační analýza. Zavedení spinu do vlnové funkce, spinorbitály. Slaterovy determinanty. Korelační energie, základy metody konfigurační interakce (CI).

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

Struktura molekul

Symetrie molekul. Metody studia struktury molekul (difrakční metody, hmotnostní spektrometrie,

fotoelektronová spektroskopie, rentgenová fluorescenční analýza, Mössbauerův jev). Molekulová mechanika.

Elektrické, magnetické a optické vlastnosti molekul

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

Molekulová spektra

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

Magnetické rezonanční spektroskopie

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

Literatura:

- Atkins P.W.: *Fyzikálna chémia*. 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 atómov a molekul*. SPN; Bratislava 1980
- Polák R., Zahradník R.: *Kvantová chemie*. SNTL, Praha 1985

Okruhy otázek – volitelné předměty:

Analytická chemie

Analytické reakce

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

Gravimetrie

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

Titrační metody

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

Elektroanalytické metody

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

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

Konduktometrické metody: Přímá konduktometrie, konduktometrické titrace.

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

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

Optické analytické metody

Obecné základy: Elektromagnetické záření a jeho interakce s látkou, teoretické základy spektroskopických metod včetně fyzikálních zákonů, instrumentace spektroskopických metod v oblasti molekulových a atomových optických spekter (zavádění vzorku, zdroje záření, atomizační prostředí, kvety a prostředí pro absorpční a

luminiscenční měření, monochromatizace a detekce záření), kvalitativní a kvantitativní aspekty, analytické parametry spektrálních metod, aplikace optických metod v chemické a strukturní analýze.

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

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

Analytická hmotnostní spektrometrie

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

Lasery v analytické chemii

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

Separční metody

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

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

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

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

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

Základy analýzy organických sloučenin

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

Analýza materiálů

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

Analýza biologických vzorků

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

Analytické metody v praxi

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

Statistika a hodnocení analytických výsledků a metod

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

Literatura:

- Sommer L.: *Základy analytické chemie I*, VUTium Brno 1998.
- Sommer L. a kolektiv: *Základy analytické chemie II*, VUTium Brno 2000.
- Kellner R., Mermet J. M., Otto M., Widmer H. M.: *Analytical Chemistry*, Wiley 1998.
- Skoog D. A.: *Analytical chemistry : an introduction*. 7th ed. Fort Worth : Saunders College Publishing, 1999.
- Skoog D. A., Holler, J. F., Nieman T. A. : *Principles of instrumental analysis*. 5th ed. Philadelphia : Saunders College Publishing, 1998.
- Skoog D. A. at. al.: *Fundamentals of analytical chemistry*. 8th ed. Brooks/Cole 2004.
- Harris D. C.: *Quantitative chemical analysis*. 4th ed. New York : W.H. Freeman, 1995.
- Volka K.: *Analytická chemie II*. VSCHT Praha 1995.
- Zýka J. a kol. : *Analytická příručka*. Díl I a II. SNTL Praha, 1988.

Anorganická chemie

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Literatura:

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

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

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

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

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

Literatura:

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

Chemie životního prostředí

Chemie životního prostředí

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

Základní skupiny polutantů: oxid siřičitý, oxidy dusíku, oxid uhličitý, freony, atmosférické aerosoly, prach, těžké kovy (rtuť, kadmium, olovo), uhlovodíky a ropné znečištění, pesticidy, polycyklické aromatické uhlovodíky, chlorované polutanty (chlorované fenoly, polychlorované 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, K_{max} K_d. Reakce polutantů v atmosféře, fotochemické reakce. Smog oxidační a redukční.

Znečištění hydrosféry

Voda a její funkce, hydrologický cyklus, voda atmosférická, povrchová, podzemní, pitná, užitková a provozní. Znečišťování 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 znečišťování, 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 r a s.

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. Tučky a jejich struktura, zmydelnění. Substituční deriváty karboxylových kyselin (hydroxykyseliny-laktony, laktidy, aminokyseliny aktamy, halogenkyseliny, 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, prazimidin (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 chémie*, 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 chémie*. 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:

Stabilita intermetalických fází - http://is.muni.cz/th/78384/prif_m/

Interpretation of indirect nuclear spin-spin coupling constants using localized molecular orbitals - http://is.muni.cz/th/141938/prif_m/

Redoxní a povrchové vlastnosti polychlorovaných bifenylů - Delor 106 - http://is.muni.cz/th/78013/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 Fyzikální chemie a dvou dalších předmětů ze skupiny Analytická chemie, Anorganická chemie, Biochemie, 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					
C5020	Chemická struktura	2+2	2/0	zk	Brož
C5030	Chemická struktura - seminář	1	0/1	z	Brož
C7000	Oborový seminář I	2	0/2	z	Šob
C7001	Diplomová práce I	3	0/0/3	kz	vedoucí práce
C7777	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	Příhoda
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	14			
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	6			
Jarní semestr					
Povinné předměty					
C6950	Chemická exkurze	0	0/0	z	Janků
C6960	Odborná praxe	0	0/0	z	Šindelář
C8000	Oborový seminář II	2	0/2	z	Šob
C8001	Diplomová práce II	5	0/0/5	kz	vedoucí práce
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	14			
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	9			

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	Šob
C9001	Diplomová práce III	12	0/0/12	kz	vedoucí práce
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	3			
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	13			
Jarní semestr					
Povinné předměty					
CA000	Oborový seminář IV	2	0/2	z	Šob
CA001	Diplomová práce IV	20	0/0/20	kz	vedoucí práce
JA002	Pokročilá odborná angličtina - zkouška	2	0/0	zk	Hranáčová
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	6			
Fakulta nabízí také výuku francouzštiny, němčiny, ruštiny a španělštiny.					

Povinně volitelné předměty

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinně volitelné předměty					
C5300	Statistická termodynamika	2+2	2/0	zk	Šob, Vřešťál
C5320	Fyzikálně chemické základy NMR	3+2	2/1	zk	Sklenář, Fiala
C5340	Nerovnovážné systémy	2+2	2/0	zk	Kučera
C5860	Aplikovaná NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	Brož
C5880	Základy stereochemie	2+2	2/0	zk	Černík, Toužín
C5885	Základy stereochemie - seminář	2	0/2	z	Černík, Toužín
C7050	Elektroanalytické metody	2+2	2/0	zk	Trnková
C7280	Elektrodová kinetika	2+2	2/0	zk	Trnková
C7700	Chemie nekovů	2+2	2/0	zk	Černík
C8102	Speciální metody - laboratorní cvičení	5	0/0/5	kz	Farková, Hrdlička, Lubal
C9920	Úvod do kvantové chemie	2+2	2/0	zk	Munzarová
F7460	Fyzika pevných látek pro nefyzikální obory	2+2	2/0	zk	Holý
Jarní semestr					
Povinně volitelné předměty					
C6250	Metody chemického výzkumu - praktikum	5	0/0/5	kz	Farková, Vrbková
C6310	Symetrie molekul	2+2	2/0	zk	Kubáček
C6320	Chemická kinetika	2+2	2/0	zk	Sopoušek
C6330	Chemická kinetika - seminář	1	0/1	z	Sopoušek
C6740	Elektrické vlastnosti molekul	2+2	2/0	zk	Trnková
C6750	Materiálová chemie kovů	2+2	2/0	zk	Brož, Vřešťál
C6770	NMR Spectroscopy of Biomolecules	2+2	2/0	zk	Židek, Fiala
C8400	Kvantová chemie pevných látek, výpočty elektronové struktury	2+2	2/0	zk	Šob
C9930	Metody kvantové chemie	2+2	2/0	zk	Munzarová

Doporučené volitelné předměty

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Doporučené volitelné předměty					
C5040	Jaderná chemie	2+2	2/0	zk	Příhoda
C5060	Metody chemického výzkumu	2+2	2/0	zk	Táborský, Bittová, Preisler
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
C5440	Separční metody	1+2	1/0	zk	Mazal
C5870	EPR spektroskopie	2+2	2/0	zk	Kubáček
C5900	Hmotnostní spektrometrie	2+2	2/0	zk	Šimek, Klánová
C5910	Chromatografické metody I.	2+2	2/0	zk	Šimek
C6020	Jaderná chemie - laboratorní cvičení	3+1	0/0/3	kz	Křivohlávek
C6730	Fázové rovnováhy	2+2	2/0	zk	Sopoušek
C7031	Atomová spektrometrie	2+2	2/0	zk	Kanický, Otruba
C7410	Struktura a reaktivita	2+2	2/0	zk	Klán
C7670	Izotopové metody	1+2	1/0	zk	Křivohlávek
C7680	Izotopové metody - laboratorní cvičení	3	0/2	kz	Křivohlávek
C7790	Počítačová chemie a molekulové modelování I	1+2	1/0	zk	Koča, Kulhánek
C7800	Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení	1	0/1	z	Koča, Kulhánek
C7895	Hmotnostní spektrometrie biomolekul	2+2	2/0	zk	Preisler
C7995	Advanced Methods of Biomolecular NMR	2+2	2	zk	Fiala, Židek
C7999	Advanced Methods of NMR Spectroscopy	2+1	0/0/2	zk	
C8780	Organic Photochemistry	2+2	2/0	zk	Klán
C8845	Modelování chemických systémů v roztocích	2+2	2/0	zk	Lubal
C9530	Strukturní biochemie	2+2	2/0	zk	Židek
Jarní semestr					
Doporučené volitelné předměty					
C5040	Jaderná chemie	2+2	2/0	zk	Příhoda
C5305	Computational Thermodynamics	2+2	2	zk	Pavlů, Vřešťál
C6010	Toxikologie	1+2	1/0	zk	Picka
C6020	Jaderná chemie - laboratorní cvičení	3	0/0/3	kz	Křivohlávek
C6170	Analýza materiálů - cvičení	5	0/0/5	kz	Komárek
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
C6790	Hmotnostní spektrometrie	2+2	2/0	zk	Brož, Vřešťál
C6800	Multinukleární NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	Pinkas
C6815	Struktura a vlastnosti polymerů	2+2	2/0	zk	Šindelář
C6830	Radioekologie	1+2	1/0	zk	Křivohlávek
C6850	Chromatografické metody II	2+2	2/0	zk	Šimek

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
C6860	Moderní metody analýzy organických polutantů	2+2	2/0	zk	Klánová
C7670	Izotopové metody	1+2	1/0	zk	Křivohlávek
C7680	Izotopové metody - laboratorní cvičení	3	0/2	kz	Křivohlávek
C8500	Mechanismy organických reakcí	2+2	2/0	zk	Klán
C8510	Mechanismy organických reakcí - seminář	1	0/1	z	Klán
C8700	Technologie chemických výrob	2+2	2/0	zk	Šindelář
C8800	Rtg strukturní analýza	2+2	2/0	zk	Marek
C8810	Chemie přechodných prvků	2+2	2/0	zk	Novosád
C8820	Metody studia rovnováh a kinetiky reakcí	2+2	2/0	zk	Havel
C8855	Počítačová chemie a molekulové modelování II	2	1/0	k	Koča, Kříž
C8856	Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení	1	0/1	z	Koča, Kříž
C8880	Vybrané metody analýzy pevných látek	1+2	1/0	zk	Kanický, Otruba
C8950	NMR - Strukturní analýza	2+2	2/0	zk	Marek
GE081	Základy geochemie	3	2/0	kz	Zeman

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 účástí nanomateriálů (GCP206/10/J012)	GAČR	2010 - 2012
ÚCh	Oxidy a fosforečnany kovů jako formy jaderného odpadu: studium sonochemického srážení, tepelných přeměn a rozpustnosti (GAP207/11/0555)	GAČR	2011 - 2013
RECETOX	Zdravotní rizika v Arktidě: Vliv změn v cyklech kontaminantů způsobených změnami klimatu na zdravotní rizika v Arktidě a Evropě (ArcRisk)	EU	2009-2013
RECETOX	Dlouhodobý monitoring perzistentních organických polutantů ve volném ovzduší Afriky.	EU	2010-2012
RECETOX	MonAirNet - Posílení příhraniční spolupráce mezi ČR a Rakouskem v oblasti hodnocení zatížení volného ovzduší POPs daného regionu.	EU	2010-2012
RECETOX	AirToxPM - Komplexní charakterizace prachových frakcí ve volném ovzduší	EU	2007-2011

I – Uskutečňování akreditovaného stud. programu mimo sídlo vysoké školy

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

D – Charakteristika studijních předmětů

CA000 Oborový seminář IV

Vyučující: [prof. RNDr. Mojmir Šob 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:

- 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 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 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)

C5020 Chemická struktura

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

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

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

Osnova:

- 1. Difrakce elektronů a rtg. záření . Elektrony jako částice i záření, kvantová čísla, difrakce na souboru rovin (Huygensova a Ewaldova konstrukce), přímá a reciproká mřížka, interference (Laueho a Braggova metoda), radiální distribuční funkce (Wierlova rovnice). 2. Absorpce elektronů a gama záření. Hmotnostní spektrometrie (metody ionizace, rozlišení a detekce, skupina molekulového píku, hlavní typy fragmentace). Moessbauerova spektroskopie (isotopový posun, kvadrupolové štěpení). 3.

Fotoelektronová spektroskopie. Absorpce rtg. fotonu (XPS, ESCA), elektronu (Auger) a UV kvanta (UPS). Rtg. fluorescence. 4. Absorpce UV a vis. záření. Elektronová spektroskopie, (Franckův-Condonův princip, vibrační a rotační struktura energetických diagramů) termická relaxace, fluorescence, fosforescence (typy elektronových přechodů, částice v jednorozměrné potenciálové jámě, chromofory, auxochromy, posuny absorpcí vnějšími a vnitřními vlivy). Využití elektronové spektroskopie ve strukturní a kvantitativní analýze (Lambertův-Beerův zákon). 5. Molekuly v elektrickém poli (polarizovatelnost, indukovaný a permanentní dipolový moment, permitivita dielektrika). Polarizace indukovaná a orientační, Clausius-Mossottiho a Debyeova rovnice. Měření dipolových momentů (Halverstadt-Kumlerova metoda, Gugenheim-Smithova metoda). Index lomu a molární refrakce. 6. Molekuly v elektrickém poli světelné vlny. Rayleighův a Ramanův rozptyl, Ramanova spektroskopie (anisotropie polarizovatelnosti, depolarizace, Stokesovy a antistokesovy přechody, Ramanova spektra vibrační a rotační). 7. Absorpce IR a MW záření. IR spektra vibrační (harmonický a anharmonický oscilátor, energie vibračních hladin, typy normálních vibrací). Přechody mezi vibračními energetickými hladinami (NIR spektroskopie v kvalitativní a kvantitativní analýze). Spektra vibrační, rotační a rotační (tuhý a elastický rotor, rotační distorsní konstanta). 8. Přechod světla látkami. Lom světla (Snellův zákon, měření indexu lomu, závislost na vlnové délce, hustotě). Vliv elektrického pole (Kerrův efekt, Kerrův faktor a konstanta a jejich využití ve strukturní analýze). 9. Optická aktivita (specifická otáčivost, závislost na vlnové délce, Drudeova rovnice, Cottonův efekt, optická rotační disperse, cirkulární dichroismus). Optická otáčivost a struktura (absolutní hodnota, oktantové pravidlo). 10. Molekuly v magnetickém poli. (Magnetická indukce, magnetizace, anisotropie magnetické susceptibility. Dielektrika, paramagnetika, ferromagnetika (Curieův zákon, Weisssova 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: 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 tematům přednášky Chemická struktura (C5020). Studenti využití získaných informací ze spektroskopických metod (hmotnostní spektrometrie, difrakční analýza, IČ spektroskopie, NMR atd.) k identifikaci chemické struktury a budou 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 multiplétů, 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. (příř 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 b^+ , b^- , elektronový záchyt (a následné děje): změna kvarkového složení nukleonu, posunové zákony, hmotnostní podmínky, přeměnová energie, spektrum emitovaných částic, výběrová pravidla pro změnu spinu a parity. Přeměna α : výskyt, přeměnová energie, spektrum emitovaných částic, výklad pomocí tunelového efektu. Procesy spojené s deexcitací jádra: emise fotonů (přechody elektrické a magnetické, výběrové pravidlo, okamžitá a zpožděná emise, jaderné izomery), vnitřní konverze, emise nukleonů. Samovolné štěpení: tunelový efekt, souvislost s kapkovým modelem jádra, aktivační energie, parametr štěpení. Větvené

přeměny. Odrazová energie (odvození) a chemické následky radioaktivních přeměn, vliv změny atomového čísla. 4. Kinetika radioaktivních přeměn Základní zákon radioaktivních přeměn, přeměnová konstanta, rychlost přeměny, aktivita, měrná aktivita, jednotky. Časová změna aktivity, poločas přeměny, jeho určování z časové změny aktivity, poločas u větvené přeměny. Statistický charakter radioaktivní přeměny. Hmotnost radioaktivního nuklidu, určování velmi dlouhých poločasů. Chemické chování stopových koncentrací radioaktivních nuklidů. Určování krátkých dob života excitovaných hladin. Kinetika hromadění radioaktivního produktu radioaktivní přeměny (odvození). Trvalá radioaktivní rovnováha, přehled radioaktivních řad, riziko radonu. Přechodná radioaktivní rovnováha. Generátor krátkodobého radioaktivního nuklidu. Přirozená radioaktivita a radioaktivní prvky. 5. Ionizující záření Základní pojmy: ionizace, excitace, absorpce a dosah záření, sdělování energie, změny energie a toku záření při průchodu látkou. Dávka záření, dávkový příkon, expozice, expoziční příkon, lineární přenos energie. Mechanismus absorpce záření alfa (jaderné brždění, 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 g a neutronů, stanovení vlhkosti z rozptylu neutronů, stanovení specifické hmotnosti z rozptylu gama záření. Analýza metodou PIXE a radioizotopovou rtg analýzou. Chemické účinky ionizujícího záření: excitace, ionizace, osud excitovaných stavů, iontů a elektronů. Vznik a reakce radikálů. Zdroje záření pro radiolýzu. Základní reakce při radiolýze vody a uhlovodíků. Radiolýza vodných roztoků, chemická dozimetrie. Využití ionizujícího záření v technologii polymerů. Vliv ionizujícího záření na lidský organismus. Přímý a nepřímý biologický účinek záření, molekulární podstata poškození. Jakostní faktor, dávkový ekvivalent, radiační váhový faktor, ekvivalentní dávka, tkáňový váhový faktor, efektivní dávka. Deterministické účinky: obecná charakteristika, prahová dávka, faktory ovlivňující účinek ionizujícího záření na člověka, typy poškození organismu. Stochastické účinky: obecná charakteristika, formy poškození organismu, kdy lze poškození očekávat, odhad rizika, lineární bezprahová teorie a její kritika. 6. Jaderné reakce Složené jádro jako mechanismus jaderné reakce při nízkých a středních energiích projektilu, excitační energie a deexcitace složeného jádra. Energetické zabarvení jaderné reakce. Kinetika jaderné reakce, účinný průřez, závislost vzniklé aktivity na době ozařování, nasycená aktivita. Závislost výtěžku jaderné reakce na energii projektilu pro endo- a exoergické reakce, prahová energie, rezonance. Realizace jaderných reakcí: požadavky na terčový materiál, zdroje neutronů, kladných projektilů (cyklotron, lineární urychlovač) a fotonů (betatron), zpracování 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.

Metody hodnocení: Zkouška ústní.

Literatura:

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

C5060 Metody chemického výzkumu

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

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

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

Osnova:

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

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

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

Literatura:

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

C5120 Počítače v chemii a chemometrie

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

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

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

Osnova:

- 1. Odhady základních metrologických charakteristik výsledků. 2. Testování metrologických vlastností výsledků. 3. Určování matematického modelu a jeho parametrů, regrese. 4. Lineární regrese. 5. Metody obecné regrese, minimalizace funkcí. 6. Absolutní a relativní chyba. Základní zdroje chyb. Vyjádření chyby v obecném tvaru. 7. Přibližné řešení algebraických a transcendentních rovnic. Numerické řešení systémů lineárních algebraických rovnic. Numerické integrování funkcí. 8. Interpolace funkcí. Numerické derivování. Přibližné řešení diferenciálních rovnic. Metoda Monte Carlo. 9. Plánování pokusů. 10. Faktorová analýza. 11. PLS. 12. Umělé neuronové sítě.

Výukové metody: Typ výuky: přednášky, diskuse v hodině

Metody hodnocení: Typ zkoušky: písemná a ústní zkouška

Literatura:

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

C5140 Počítače v chemii a chemometrie - cvičení

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

Rozsah: 0/2/0. 2 kr. (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

C5300 Statistická termodynamika

Vyučující: [prof. RNDr. Mojmir Šob DrSc.](#), [prof. RNDr. Jan Vřešťál DrSc.](#)

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

Cíle předmětu: Obsah předmětu lze shrnout do těchto kapitol: Molekulární stavy a jejich distribuce. Boltzmannovo rozdělení a partiční funkce. Vztah termodynamických vlastností k partiční funkci. Vnitřní energie a entropie ideálního plynu. Kanonický soubor a kanonická partiční funkce pro různé módy pohybu a její výpočet ze spektroskopických dat. Rovnovážná konstanta. Statistická termodynamika reálných plynů a tekutin. Statistická termodynamika směsí: model regulárního roztoku. Statistická termodynamika ideálního krystalu: modely Einsteinův a Debyeův. Adsorpce. Fluktuace. Cílem je vysvětlit základní pojmy statistické termodynamiky a nastínit možnosti jejich uplatnění v chemii.

Osnova:

- 1. Statistická termodynamika a molekulární stavba hmoty. Postuláty statistické termodynamiky. Konfigurace a váha stavu. Populace stavu. Nejpravděpodobnější konfigurace. Metoda Lagrangeových součinitelů, Boltzmannovo rozdělení populací. 2. Molekulární partiční funkce a její interpretace. Molekulární partiční funkce harmonického oscilátoru. Výpočet populace stavu. Translační partiční funkce. 3. Vnitřní energie a entropie ve statistické termodynamice. Vnitřní energie a partiční funkce. Výpočet měrného tepla při stálém objemu. Vnitřní energie ideálního plynu. Boltzmannův vztah pro entropii. Výpočet entropie souboru oscilátorů. 4. Kanonická partiční funkce. Mikrokanonický, kanonický a grand-kanonický soubor. Partiční funkce kanonických souborů. Výpočet vnitřní energie a entropie pomocí kanonické partiční funkce. Porovnání statis-tických a termodynamických veličin. Partiční funkce ideálního plynu. 5. Entropie jednoatomového plynu. Sackurova-Tetrodeova rovnice. Fyzikální statistiky. 6. Chemické aplikace statistické termodynamiky. Výpočet Gibbsovy energie z partiční funkce. Příspěvky k partiční funkci: translační, vibrační, rotační a elektronový. 7. Střední hodnota energie. Rotační a vibrační teplota. Ekvipartiční princip. Výpočet tepelné kapacity plynů. 8. Statistické vyjádření chemické rovnováhy. Výpočet rovnovážné konstanty reakce pomocí partičních funkcí reaktant a produktů. 9. Statistická termodynamika reálného plynu. Párové potenciály. Konfigurační integrál. Termodynamické funkce při párových interakcích. Tvorba klastrů. Viriální koeficienty. Reziduální entropie. 10. Statistická termodynamika kapalin. Buňková teorie kapalin a stlačených plynů. Kritické veličiny. Teorem korespondujících stavů. Koncepce volného objemu kapalin. Výpočet tlaku nasycených par. Distribuční funkce v jednoatomových kapalinách. Radiální korelační funkce. 11. Statistická termodynamika krystalu. Einsteinův a Debyeův model. Charakteristické teploty. Fonony. 12. Vibrační a konfigurační entropie. Model regulárního roztoku. Mřížková teorie roztoků polymerů (Flory-Huggins). Adsorpce. 13. Fluktuační částic a termodynamických veličin. Statistika výskytu fluktuačních energií a termodynamických proměnných. Brownův pohyb. Souvislost mezi chemickou rovnováhou a chemickou kinetikou. Spontánní organizace v systémech.

Výukové metody: Teoretická příprava zaměřená na praktické aplikace ve výpočtech fázových diagramů.

Metody hodnocení: Výuka probíhá týdně, ukončení je ústní zkouškou. Příklady počítají studenti jako domácí úkoly, kontrola probíhá při přednáškách.

Literatura:

- Atkins, P. W. *Physical chemistry*. 5th ed. Oxford : Oxford University Press, 1994. 1031 s. ISBN 0-19-269042-6. info
- Boublík, Tomáš. *Statistická termodynamika*. Vyd. 1. Praha : Academia, 1996. 199 s. ISBN 80-200-0566-8. info

C5305 Computational Thermodynamics

Vyučující: [Mgr. Jana Pavlů Ph.D.](#), [prof. RNDr. Jan Vřešťál Dr.Sc.](#)

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

Cíle předmětu: Main aims of the course are: - understanding of the base of calculation of phase equilibria in various systems; - retrieving of the knowledge of experimental methods necessary for successful calculation of phase diagrams; - retrieving of the knowledge of theoretical methods for modeling of Gibbs energy of phases; - gaining the information how to assess literature data and perform optimization of them together with experimental and theoretical information; - creating consistent database for successful prediction of stable equilibrium state for industrial application; At the end of the course, students should be able to calculate phase diagrams and use them for solution of practical applications.

Osnova:

- 1. Introduction: Computational thermodynamics, past and present of CALPHAD technique. Thermodynamic basis: laws of thermodynamics, functions of state, equilibrium conditions, vibrational heat capacity, statistical thermodynamics.
- 2. Crystallography: connection of thermodynamics with crystallography, crystal symmetry, crystal structures, sublattice modeling, chemical ordering. Equilibrium calculations: minimizing of Gibbs energy, equilibrium conditions as a set of equations, global minimization of Gibbs energy, driving force for a phase.
- 3. Phase diagrams: definition and types, mapping a phase diagram, implicitly defined functions and their derivatives. Optimization methods: the principle of the least-squares method, the weighting factor. Marquardt's algorithm.
- 4. Sources of thermodynamic data: first principles calculations, the density functional theory and its approximations, DFT results at 0 K, going to higher temperatures. Experimental data used for the optimization, calorimetry, galvanic cells, vapor pressure, equilibria with gases of known activity.

- 5. Sources of phase equilibrium data: thermal analysis, quantitative metallography, microprobe measurements, two-phase tie-lines, X-ray, electron and neutron diffraction.
- 6. Models for the Gibbs energy: general form of Gibbs-energy model, temperature and pressure dependences, metastable states, variables for composition dependence.
- 7. Models for the Gibbs energy: modeling particular physical phenomena, models for the Gibbs energy of solutions, compound-energy formalism, the ideal-substitutional-solution model, regular-solution model.
- 8. Models for the excess Gibbs energy: Gibbs energy of mixing, the binary excess contribution to multicomponent systems, the Redlich-Kister binary excess model, higher-order excess contributions: Muggianu, Kohler, Colinet and Toop.
- 9. Models for the excess Gibbs energy: associate-solution model, quasi-chemical model, cluster-variation method, modeling using sublattices: models using two sublattices.
- 10. Models for the excess Gibbs energy: models with three or more sublattices, models for phases with order-disorder transitions Gibbs energy for phases that never disorder, models for liquids, chemical reactions and models.
- 11. Assessment methodology: literature searching, modeling of the Gibbs energy for each phase, solubility, thermodynamic data, miscibility gaps, modeling terminal phases.
- 12. Assessment methodology: modeling intermediate phases, crystal-structure information, compatibility of models, thermodynamic information, determining adjustable parameters, decisions to be made during assessment, checking results of optimization and publishing it.
- 13. Creating thermodynamic databases: unary data, model compatibility, naming of phases, validation of databases, nano-materials in structure alloys and lead-free solders. Examples using databases: Sigma-Phase Formation in Ni-based anticorrosion Superalloys, Intermetallic Phases in Lead-Free Soldering, Equilibria with Laves Phases for aircraft engines.

Výukové metody: Teoretická příprava s využitím pro praktické uplatnění ve výpočtech fázových diagramů.

Metody hodnocení: Individual homework: calculation of one phase diagram, Oral exam

Literatura:

- Computational Thermodynamics. The Calphad Method. Hans Leo Lucas, Suzana G.Fries, Bo Sundman: Cambridge Univ.Press, 2007, 312 s., ISBN 978-0-521-86811-2.
- Saunders, Nigel - Miodownik, Peter A. *Calphad : calculation of phase diagrams : a comprehensive guide*. Oxford : Pergamon, 1998. xvi, 479 s. ISBN 0-08-042129-6. info

C5320 Fyzikálně chemické základy NMR

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

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

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

Osnova:

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

biomolekul: proteiny a peptidy, nukleové kyseliny, získávání strukturálních parametrů: měření vzdáleností vodíkových atomů, určování dihedrálních úhlů, matematická rekonstrukce prostorové struktury makromolekul.

Výukové metody: Přednášky a cvičení

Metody hodnocení: Ústní zkouška

Literatura:

- *Understanding NMR spectroscopy*. Edited by James Keeler. Chichester : Wiley, 2005. xv, 459 p. ISBN 9780470017876. info
- *Protein NMR spectroscopy principles and practice*. San Diego : Academic Press, 1996. 587 s. ISBN 0-12-164490-1. info
- *NMR and the periodic table*. Edited by Robin Kingsley Harris - Brian E. Mann. London : Academic Press, 1978. 459 s. ISBN 0-12-327650-0. info
- Cavanagh, John - Fairbrother, Wayne J. *Protein NMR Spectroscopy. Principles and Practice*. San Diego : Academic Press, 1996. 587 s. ISBN 0-12-164490-1. info
- *Two-dimensional NMR spectroscopy : applications for chemists and biochemists*. Edited by William R. Croasmun - Robert M. K. Carlson. 2nd ed. New York : VCH Publishers, 1994. xxii, 958. ISBN 1-56081-664-3. info
- Sanders, Jeremy K. M. *Modern NMR spectroscopy : a workbook of chemical problems*. 2nd ed. Oxford : Oxford University Press, 1993. 127 s. ISBN 0-19-855812-0. info
- Evans, Jeremy N. S. *Biomolecular NMR spectroscopy*. Oxford : Oxford University Press, 1995. xvi, 444 s. ISBN 0-19-854766-8. info
- Hoch, Jeffrey C. - Stern, Alan S. *NMR data processing*. New York : Wiley-Liss, 1996. xi, 196 s. ISBN 0-471-03900-4. info
- Hore, Peter J. - Jones, Jonathan A. - Wimperis, Stephen. *NMR : the toolkit*. 1st pub. Oxford : Oxford University Press, 2000. 85 s. ISBN 0-19-850415-2. info
- Rahman, Atta-ur-. *One and Two Dimensional NMR Spectroscopy*. 1. vyd. Amsterdam : Elsevier Science Publishers B.V., 1989. 578 s. ISBN 0-444-87316-3. info
- Ven, Frank J. M. van de. *Multidimensional NMR in Liquids : basic principles and experimental methods*. New York : VCH Publishers, 1995. 399 s. ISBN 1-56081-665-1. info

C5340 Nerovnovážné systémy

Vyučující: [prof. RNDr. Igor Kučera DrSc.](#)

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

Cíle předmětu: Studenti by měli získat elementární představu o možnostech aplikace nerovnovážné termodynamiky a fenomenologické kinetiky při popisu procesů v (bio)chemických systémech. Detailní znalosti používaného matematického aparátu nebudou požadovány, důraz bude kladen na pochopení podstaty problémů.

Osnova:

- A. Úvod do termodynamiky nevratných procesů 1. Produkce entropie 2. Fenomenologické rovnice a Onsagerovy reciproční vztahy 3. Evoluční kritéria a stabilita stacionárních stavů 4. Řešení vybraných úloh B. Termodynamická analýza spřažených procesů 1. Přeměna energie 2. Osmoza a elektrokinetické jevy 3. Termoelektrické jevy C. Matematické modelování nelineárních dynamických systémů 1. Základní pojmy; atraktory 2. Bifurkace 3. Vznik prostorových struktur 4. Oscilující reakce Belousova a Žabotinského 5. Analýza řízení metabolismu 6. Prebiotická evoluce

Výukové metody: Přednášky s demonstracemi

Metody hodnocení: Jednosemestrová přednáška v rozsahu 2 hod týdně. Zahrnuje i počítačové modelování a praktickou demonstraci oscilující reakce. Základem zkoušky (kolokvia) je písemný test.

Literatura:

doporučená literatura

- Fischer, Oldřich - Kučera, Igor. *Nerovnovážné soustavy : termodynamika nevratných chemických a buněčných procesů*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1987. 154 s. info
- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info
- Coveney, Peter V. - Highfield, Roger. *Šíp času : cesta vědou za rozluštěním největší záhady lidstva*. 1. vyd. Ostrava : Oldag, 1995. 472 s., [1. ISBN 80-85954-08-7. info

- Gleick, James. *Chaos :vznik nové vědy*. Translated by Jaroslav Sedlář - Renata Kamenická. [1. vyd.]. Brno : Ando Publishing, 1996. 349 s. ISBN 80-86047-04-0. info

C5440 Separační metody

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

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

Cíle předmětu: Během kurzu student získá základní informace o hlavních separačních metodách používaných v organické chemii (krystalizace, destilace, sublimace, extrakce a p.) s důrazem na chromatografické metody a aspekty jejich praktického použití. Budou zmíněny také procesy separace s využitím membrán a elektromigrační metody.

Osnova:

- 1. Chromatografické metody. Úvod, základní teorie a pojmy. Klasifikace chromatografických systémů a postupů. Základní teoretické modely popisující chromatografii. Retenční rovnice, teoretické patro, faktory ovlivňující separační účinnost, eluční poměr a rozlišení.
- 2. Plynová chromatografie. Základní pojmy. Van Deemterova rovnice. Technika GC. Blokové schéma plynového chromatografu. Nosný plyn, techniky dávkování vzorku, náplňové a kapilární chromatografické kolony, stacionární fáze, enantioselektivní kolony.
- 3. Plynová chromatografie. Hlavní metody detekce používané v GC. Plamenově ionizační detektor (FID), tepelně vodivostní detekce (TCD), elektronový záchyt (ECD), spojení GC s hmotnostní spektrometrem (GC-MS).
- 4. Plynová chromatografie. Kvalitativní analýza, identifikace z elučních údajů, eluční závislosti (Kovatsovy indexy), selektivní detektory. Kvantitativní analýza, faktory ovlivňující přesnost kvantitativní analýzy, metody kalibrace.
- 5. Kapalinová chromatografie. Základní pojmy. Chromatografie na sloupci, flash chromatografie - základy techniky, příprava kolon, detekce, stacionární fáze. Planární chromatografie. Papirová chromatografie, tenkovrstvá chromatografie.
- 6. Vysokoučinná kapalinová chromatografie (HPLC). Blokové schéma HPLC. Mobilní fáze, čerpadla, odplynění, gradient mobilní fáze. Dávkování vzorku. Kolony pro HPLC, stacionární fáze, výběr kolony, enantioselektivní fáze. Detektory pro HPLC, UV-VIS a fluorescenční detektor, refraktometr, ELSD, polarimetrická detekce.
- 7. Iontová, gelová a afinitní chromatografie. Klasifikace ionexů a jejich vlastnosti - selektivita ionexů. Rovnováhy při výměně iontů. Chelatační sorbenty. Vylučovací kapalinová chromatografie (GPC, SEC), retence v SEC, stacionární fáze - anorganické a organické gely. Biospecifická afinitní chromatografie - retence, bioafinitní sorbenty a podmínky chromatografie.
- 8. Příprava vzorku pro chromatografickou analýzu. Problém získání reprezentativního vzorku. Isolační a koncentrační techniky. Derivatizační metody v GC a HPLC.
- 9. Extrakční metody. Rovnováhy mezi dvěma kapalnými fázemi. Extrakce a roztřepávání. Superkritická extrakce. Voolba a vlastnosti superkritických mobilních fází. Příklady aplikací.
- 10. Destilace. Obecné principy. Prostá desilace. Rektifikace, pojem teoretického patra, faktory ovlivňující separační účinnost kolon, typy destilačních kolon. Destilace za sníženého tlaku, molekulová destilace, destilace s vodní parou, azeotropní destilace, extrakční destilace.
- 11. Krystalizace. Vymezení pojmu. Krystalizace z roztoku, vznik krystalizačních center a růst krystalu. Krystalizace z taveniny, zónové tavení. Krystalizační metody dělení enantiomerů, racemická sloučenina, racemát. Přímá krystalizace a dělení přes diastereomerní sloučeniny.
- 12. Membránové separační procesy. Membránové procesy v gradientu chemického potenciálu, dialýza, osmóza. Procesy v gradientu elektrického potenciálu, elektrodialýza, elektroosmóza. Procesy v gradientu tlaku, reversní osmóza, ultrafiltrace.
- 13. Elektroforetické metody. Základní pojmy, pohyblivost iontů, transportní děje. Doprovodné děje při elektroforetické separaci. Volná elektroforéza, Kapilární zónová elektroforéza, izotachoforéza.
- 14. Další separační metody. Sublimace. Vymezení pojmu. Různé techniky sublimace, gradientová sublimace, mrazová sublimace - lyofilizace. Sedimentační metody. Základní pojmy, sedimentační analýza.

Výukové metody: Přednášky

Metody hodnocení: Ústní zkouška, popřípadě kolokvium.

Literatura:

- Soják, Ladislav. *Separačné metódy v organickej chémii a*. 1. vyd. Bratislava : Univerzita Komenského, 1985. 240 s. info

- Churáček, Jaroslav. *Analytická separace látek*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1990. 384 s. ISBN 80-03-00569-8. info
- Poole, Colin F. - Poole, Salwa K. *Chromatography today*. Amsterdam : Elsevier, 1991. 1026 s. ISBN 0-444-89161-7. info
- Kolektiv., *Moderní separační metody*, ČSAV Praha 1988.

C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie

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

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

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

Osnova:

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

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

Metody hodnocení: Ústní zkouška buď v angličtině nebo češtině.

Literatura:

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

C5870 EPR spektroskopie

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

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

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

Osnova:

- 1. Historie a oblast použití ESR spektroskopie. Radikály v chemii. 2. Energie magnetických dipólů v magnetickém poli. Kvantování momentu hybnosti. 3. Interakce magnetických dipólů s elektromagnetickým zářením. Význam g-faktoru. 4. Populace energetických hladin. Spinová relaxace. Saturace. Tvar spektrálních čar. 5. Kvantitativní měření v ESR spektroskopii. 6. Společné rysy NMR a ESR spektroskopie. 7. Základy přístrojové techniky ESR spektroskopie, rezonátory, zdroj mikrovln, magnet, modulace, detekční systém. 8. Volba experimentálních podmínek, mikrovlnný výkon, modulační amplituda, koncentrace radikálů, teplota. 9. Hyperjemné interakce, anizotropní a izotropní složka. 10. Rozdělení nepárového elektronu v molekule radikálu, spinová hustota a spinová populace. 11. Mechanismus pi-pi-spinové polarizace, McLachlanova teorie. 12. Mechanismus pi-sigma-spinové

polarizace, Karplus-Fraenkelova rovnice, McConnellůva rovnice, hyperkonjugace. 13. Analýza EPR spekter v kapalně fázi. 14. Běžné typy radikálů.

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

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

Literatura:

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

C5880 Základy stereochemie

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

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

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

Osnova:

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

molekul koordinačních sloučenin, struktura anorganických polymerů, geometrie polyedrických molekul, struktura boranů, klastery.

Výukové metody: Přednáška

Metody hodnocení: ústní zkouška

Literatura:

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

C5885 Základy stereochemie - seminář

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

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

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

Osnova:

- Stejná jako u přednášky Základy stereochemie (C5880)

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

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

Literatura:

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

C5900 Hmotnostní spektrometrie

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

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

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

Osnova:

- I. Historie, principy hmotnostní spektrometrie, základní pojmy.

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

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

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

Literatura:

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

C5910 Chromatografické metody I.

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

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

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

Osnova:

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

- 13. Trendy v rozvoji chromatografických metod.
- 14. Příklady aplikací chromatografických metod.

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

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

Literatura:

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

C6010 Toxikologie

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

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

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

Osnova:

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

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

Výukové metody: přednášky doprovázené odkazem na odpovídající zákonné podklady

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

Literatura:

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

C6020 Jaderná chemie - laboratorní cvičení

Vyučující: [Mgr. Jiří Křivohlávek](#)

Rozsah: 0/0/3. 3 kr. Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Na konci kurzu bude student schopen: používat přístroje pro detekci a měření ionizujícího záření; pracovat se zdroji ionizujícího záření; separovat a studovat 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 nízkenergetického záření beta metodou kapalné scintilace.

Výukové metody: Laboratorní cvičení

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

Literatura:

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

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 kademnatého, zinečnatého a olovnatého voltametricky s využitím automatického laboratorního analyzátoru EcaFlow 150GLP a programu EcaStat.

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

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

Literatura:

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

C6290 Atomová absorpční spektrometrie

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

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

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: - porozumět 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, normová 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 přidavku. 7. Zavádění roztoků do ICP; pneumatické zmlžovače (koncentrický, úhlový, Babingtonův, žlábkový, síťkový, fritový); ultrazvukový zmlžovač, zmlžovač s přímým vstřikováním, 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); elektroabrize (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

C6310 Symetrie molekul

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

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

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

Osnova:

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

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

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

Literatura:

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

C6320 Chemická kinetika

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

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

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

Osnova:

- 1. Základní pojmy chemické kinetiky: rychlost reakce, rozsah reakce, rychlostní rovnice, řád reakce, elementární reakce, molekularita. Metody k určení řádu reakce 1: počátečních rychlostí, zlomkových časů, poločas reakce, střední doba života. 2. Metody k určení řádu reakce 2: derivační a integrační rychlostní rovnice pro reakce 1. a 2. řádu, nelineární rovnice, metoda izolační. 3. Reakce vratné: dynamická rovnováha, rovnovážná konstanta, reakce unimolekulární a bimolekulární, rychlostní rovnice lineární a exponenciální. 4. Reakce souběžné (paralelní): rozvětvené, konkurenční, nezávislé. Reakce následné, ustálený stav, předrovnováha. 5. Reakce katalyzované 1: homogenní katalýza, acidobazická katalýza, autokatalýza, enzymová katalýza, rovnice Michalisova-Mentenové, nestacionární kinetika, integrovaná rovnice Michaelisova-Mentenové, složité enzymové reakce (Clelandova symbolika, Kingova-Altmanova metoda), inhibice. 6. Reakce katalyzované 2: heterogenní katalýza, chemisorpce a pokrytí povrchu, adsorpční izotermy (Langmuirova, BET, Freundlichova, Temkinova), uni a bimolekulární reakce na povrchu, inhibice produktem. 7. Reakce řetězové: iniciace, propagace, terminace, reakce radikálové, reakce větvené, polymerace, hoření, exploze. 8. Reakce oscilující: oscilátory (Lotka-Volterra, Brusselátor, Oregonátor), limitní cyklus, rekurentní rovnice. Metody relaxační: teplotní, tlakový skok, ultrazvuk, mikrovlny. 9. Závislost rychlostní konstanty na teplotě 1: Arrheniova rovnice, srážková teorie, pravděpodobnostní faktor, Lindemannova teorie unimolekulárních reakcí. 10. Závislost rychlostní konstanty na teplotě 2: plochy potenciální energie aktivovaný komplex, Eyringova rovnice, reakční termodynamika. 11. Mechanismy difúze. Látkové toky a difúzní koeficienty. 1 a 2. Fickův zákon. Analytické a numerické řešení difúzních rovnic, okrajové podmínky. Difúze v neideálních soustavách. 12. Elektroodová kinetika. Mechanismus přenosu elektronu v homogenním a v heterogenním prostředí (na rozhraní elektroda/roztok), Marcusova teorie, přepětí, Butlerova a Volmerova rovnice, koeficient přenosu náboje, rychlost elektroodové reakce, elektroodový proces s chemickou reakcí (předřazená, vřazená a následná chemická reakce), heterogenní rychlostní konstanta, vyhodnocení heterogenních rychlostních, konstant pomocí běžných elektrochemických metod.

Výukové metody: Přednášky.

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

Literatura:

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

C6330 Chemická kinetika - seminář

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

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

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

Osnova:

- Stejná jako u přednášky Chemická kinetika (C6320).

Výukové metody: Diskuse skupiny. Řešení kinetických problémů.

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

Literatura:

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

- Masel, Richard I. *Chemical kinetics and catalysis*. New York : John Wiley & Sons, 2002. xiii, 952. ISBN 0-471-24197-0. info

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

C6730 Fázové rovnováhy

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

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

Cíle předmětu: Přednáška je určena zejména pro posluchače chemie a materiálového inženýrství. Obsahem jsou zejména následující témata: termodynamika vícesložkových neideálních soustav, podmínky nutné pro koexistenci fází, fázové diagramy, fázové transformace, kinetika vzniku a zániku fází, difúze v tuhé fázi, termická analýza a její aplikace, metody výpočtů a predikce fázových diagramů a možnosti kinetických simulací. Témata jsou doplněna o praktické příklady (nap. rektifikace, extrakce, tepelné zpracování materiálů, separace, mikrostruktura materiálů, nukleační mechanismy, optimalizace mechanických vlastnosti a materiálový design, materiálová životnost,). Získané znalosti umožňují posluchačům správně porozumět a kvalifikovaně řešit výraznou skupinu praktických problémů, které se objevují v chemické laboratoři, technologické praxi i při přípravě nových materiálů.

Osnova:

- 1. Základní pojmy. Termodynamické stavové funkce čisté látky a vícesložkové směsi. Standardní stavy. Fázová terminologie. Gibbsova-Duhemova rovnice. Gibbsova energie reálné soustavy, dodatkové funkce. 2. Uspořádání fází a jejich krystalová mřížka. Mízkové defekty. Termodynamika stechiometrických a nestechiometrických fází a chemických sloučenin. Zákony zachování hmoty, náboje a stechiometrie v termodynamických soustavách. Fázové pravidlo a stabilita fází. 3. Gigsova energie soustavy, chemický potenciál a aktivita. Diferenciální podmínka fázové rovnováhy, integrální podmínka fázové rovnováhy. Vznik fázové rovnováhy. 4. Matematické řešení problému fázové rovnováhy. Výpočty a predikce fázových diagramů. Metody, programy a databáze pro výpočty fázových rovnováh. Metoda CALPHAD. 5. Fázové diagramy. Základní typy fázových diagramů, znázornění fázových diagramů, možné průběhy fázových hranic. Řezy fázovými diagramy. Použití fázových diagramů. 6. Metody experimentálního studia fázových rovnováh: Získávání fázových dat, získávání termodynamických dat, měřitelné termodynamické veličiny. Termická analýza (křivky chladnutí, DTA, DSC, ...). Zdroje dat a jejich přesnost. 7. Reálné fázové rovnováhy: jednosložkové soustavy, binární soustavy (koexistence kapalná, plynná a tuhá fáze, směsi těkavých kapalin, destilace, sublimace, roztoky,). Fázové diagramy vícesložkových soustav (koexistence tuhých fází, extrakce, odstraňování nečistot, chemické sloučeniny ve fázových diagramech, intermetalika,). 8. Příklady výpočtů fázových rovnováh a fázových diagramů v reálných soustavách. Souvislosti mezi fázovými, fyzikálními a mechanickými vlastnostmi. 9. Fázové transformace. Stablní a metastablní fázové rovnováhy, bezdifúzní fázové přeměny, role difúze a nukleace při ustavování rovnovážných stavů. 10. Difúze: Základní pojmy. Atomární mechanismy difúze. Fickovy zákony. Okrajové podmínky. Analytické a numerické řešení difúzních rovnic. 11. Difúze v reálných soustavách. Atomární mobilita, látkové toky, kinetický a termodynamický faktor difúze. 12. Difúzně řízené fázové transformace.

Heterogenní reálné soustavy. Difúze a rovnováha za vysokých a nízkých teplot. Simulační výpočetní programy (DICTRA). 13. Fázové rovnováhy a difúzi řízené děje v chemické laboratoři a technologické praxi: Hrubnutí a rozpouštění fází, optimalizace technologického zpracování materiálů, homogenizace, nitridace, stabilita svarů, ochranné vrstvy, transformaních diagramy,...

Výukové metody: Přednášky.

Metody hodnocení: Ústní zkouška

Literatura:

- Porter, David A. *Phase Transformations in Metal and Alloys*. New York : Van Nostrand Reinhol, 1981. 445 s. ISBN 0-442-30439-0. info
- Saunders, Nigel - Miodownik, Peter A. *Calphad : calculation of phase diagrams : a comprehensive guide*. Oxford : Pergamon, 1998. xvi, 479 s. ISBN 0-08-042129-6. info

C6740 Elektrické vlastnosti molekul

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

Osnova:

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

Výukové metody: Přednáška s výpočty.

Metody hodnocení: písemný test, ústní zkouška

Literatura:

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

C6750 Materiálová chemie kovů

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

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

Cíle předmětu: Obsahem předmětu je výklad následujících kapitol: Struktura kovů a intermetalických sloučenin. Vlastnosti kovů a jejich zkoušení. Základy výroby kovů: krystalizace, Elektrochemická příprava kovových vrstev, Tenké kovové filmy a jejich příprava. Speciální materiály - příprava a vlastnosti. Základní typy železných slitin. Superslitiny. Základní typy neželezných slitin. Prášková metalurgie. Cílem kurzu je poskytnout základní informace týkající se chemie kovových materiálů.

Osnova:

- 1. Úvod - materiálové vědy, materiálové inženýrství, hutnictví, materiálová chemie. Vztah struktury a vlastností kovů, jejich charakterizace. 2. Základní typy struktury kovů (sc, bcc, fcc, hcp), poruchy ve struktuře kovů 3. Intermetalické sloučeniny - základní typy struktury, termodynamický popis, vlastnosti, příklady 4. Struktura a vlastnosti kovů I. - vlastnosti elektrické (polovodiče, supravodiče) - vlastnosti magnetické (feromagnetika, diamagnetika) - vlastnosti mechanické (pevnost, tažnost) 5. Struktura a vlastnosti kovů II. - vlastnosti optické (odrazivost, barva) - vlastnosti tepelné (tepelná kapacita) - vlastnosti korozní (korozní odolnost) - vlastnosti chemické (katalýza reakcí) 6. Metody zkoušení kovů - chemické, fyzikální, fyzikálně chemické, strukturní, mechanické, technologické 7. Základy výroby kovů, rafinace kovů, označování čistoty, vliv nečistot na vlastnosti kovů - srovnání rafinačních procesů - extrakční rafinační procesy, rozdělovací rovnováha 8. Krystalizace kovů - rovnováha tuhá látka-kapalina, způsoby přípravy a vlastnosti mono-krystalů, whiskery a jejich pevnost, růst nové fáze, difúze, směrová krystalizace, výpočty fázových rovnováh, základní typy fázových diagramů 9. Elektrochemická příprava kovů a jejich slitin 10. Tenké kovové filmy, jejich příprava a vlastnosti, transportní procesy v přípravě kovů metody CVD, PVD, MBE, plazmatické nástříky 11. Speciální materiály příprava a vlastnosti - Kovové kompozity, porézní kovy - Nanokrystalické kovové materiály - Nekrystalické kovové materiály (kovová skla) 12. Základní typy železných slitin: litina, ocel, třídy materiálů, legované oceli, Fe-C fázový diagram, ovlivňování struktury ocele tepelné zpracování 13. Základní typy neželezných slitin - pájky, slitiny lehkých kovů (Al, Mg) - slitiny se střední teplotou tání (Cu, Zn) - slitiny s vysokou teplotou tání (Ti) 14. Svařování kovů, slinuté kovy a kovové soustavy: prášková metalurgie

Výukové metody: Teoretická příprava formou přednášek s použitím mnoha příkladů z praxe.

Metody hodnocení: Výuka probíhá týdně, ukončení je ústní zkouškou.

Literatura:

- Callister, William D. *Fundamentals of materials science and engineering : an interactive e.text*. 5th ed. New York : John Wiley & Sons, 2001. xxi, 524 s. ISBN 0-471-39551-. info
- Barrett, Charles S. *Struktura kovů : krystalografické metody, principy a údaje : Structure of metals (Orig.)*. 1. vyd. Praha : Nakladatelství Československé akademie věd, 1959. 658 s. info
- Píšek, František. *Nauka o materiálu I*. 1. vyd. Praha : Nakladatelství Československé akademie věd, 1957. 754 s. info
- Píšek, František. *Nauka o materiálu. II. Sv. I*. 1. vyd. Praha : Nakladatelství Československé akademie věd, 1959. 658 s. info
- Píšek, František - Jeníček, Ladislav. *Nauka o materiálu III. Svazek 1., Přehled vývoje materiálů, teorie hutnických pochodů, obecné hutnictví*. Praha : Nakladatelství Československé akademie věd, 1962. 455 s. info
- Saunders, Nigel - Miodownik, Peter A. *Calphad : calculation of phase diagrams : a comprehensive guide*. Oxford : Pergamon, 1998. xvi, 479 s. ISBN 0-08-042129-6. info

C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules

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

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

Cíle předmětu: The course will provide introduction to modern NMR techniques which can be applied to extract structural information for small and mid-size biological macromolecules - peptides, proteins, DNA and RNA oligonucleotides. Experimental procedures and computational protocols for determination of three-dimensional structures and dynamics based on NMR data will be discussed. Students who finish the course successfully will understand principles of NMR and its applications to biochemical problems described in original research articles, to analyze NMR experiments and design their modification, to choose the correct approach of solving a given problem, and to combine results of individual approaches to obtain a complex picture of the studied problem. The course is designed so that students who continue to study in a PhD program will be able to apply the learned skills in their own research projects.

Osnova:

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

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

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

Literatura:

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

C6790 Hmotnostní spektrometrie

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

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

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

Osnova:

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

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

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

Literatura:

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

C6800 Multinukleární NMR spektroskopie

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

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

Cíle předmětu: V přednášce jsou diskutovány základní měřitelné veličiny NMR spekter, jako stínící konstanty a chemické posuny, skalární interakční konstanty a relaxační časy. Dále jsou zdůrazněny vlivy chemických a fyzikálních faktorů, strukturních parametrů a vliv chemické výměny na hodnoty těchto veličin. Praktické příklady a problémy jsou uvedeny z oblasti multinukleární NMR spektroskopie anorganických látek. Studenti se

v tomto kurzu naučí: Určit prvky symetrie v molekule a předpovědět počet očekávaných signálů ve spektrech přítomných NMR aktivních jader. Odhadnout přibližnou hodnotu chemického posunu ve spektru sledovaného jádra v závislosti na struktuře molekuly a elektronickém okolí jádra. Určit očekávanou multiplicitu signálu sledovaného jádra v závislosti na interakci s okolními jádry. Odhadovat přibližnou velikost interakčních konstant v závislosti na vazebných a strukturních poměrech v molekule. Posoudit jaderné, elektronické a strukturní vlivy na relaxační rychlosti jader. Posoudit vliv chemických a fyzikálních faktorů a strukturních parametrů na možnost chemické výměny a ovlivnění počtu a tvaru signálů ve spektrech.

Osnova:

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

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

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

Literatura:

- *NMR and the periodic table*. Edited by Robin Kingsley Harris - Brian E. Mann. London : Academic Press, 1978. 459 s. ISBN 0-12-327650-0. info
- Goljer, Igor - Liptaj, Tibor. *Nové metody FT NMR spektroskopie kvapalín*. 1. vyd. Bratislava : VEDA vydavateľstvo Slovenskej akadémie vied, 1986. 181 s. info
- Wehrli, F. W. - Wirthlin, T. *Interpretation of carbon-13 NMR spectra*. London : Heyden, 1980. 310 s. ISBN 0-85501-207-2. info
- *Two-dimensional NMR spectroscopy : applications for chemists and biochemists*. Edited by William R. Croasmun - Robert M. K. Carlson. 2nd ed. New York : VCH Publishers, 1994. xxii, 958. ISBN 1-56081-664-3. info
- Braun, Siegmund - Kalinowski, Hans - Otto - Berger, Stefan. *150 and more basic NMR experiments : a practical course*. 2nd exp. ed. Weinheim : Wiley-VCH, 1998. 595 s. ISBN 3-527-29512-7. info
- Breitmaier, Eberhard. *Structure elucidation by NMR in organic chemistry : a practical guide*. Translated by Julia Wade. Chichester : John Wiley & Sons, 1993. 265 s. ISBN 0-471-93381-3. info
- Schraml, Jan. *Dvourozměrná NMR spektroskopie*. 1. vyd. Praha : Academia, 1987. 130 s. info
- Sanders, Jeremy K. M. *Modern NMR spectroscopy : a workbook of chemical problems*. 2nd ed. Oxford : Oxford University Press, 1993. 127 s. ISBN 0-19-855812-0. info
- Farrar, Thomas C. - Becker, Edwin D. *Pulse and Fourier Transform NMR : Introduction to Theory and Methods*. New York : Academic Press, 1971. 115 s. info
- Friebolin, Horst. *Basic one- and two-dimensional NMR spectroscopy*. 3. vyd. Weinheim : Wiley-VCH, 1998. 385 s. ISBN 3527295135. info

- Hájek, Milan. *Kvantitativní FT NMR spektroskopie v chemické praxi*. 1. vyd. Praha : Academia, 1989. 164 s. ISBN 80-200-0096-8. info
- Macomber, Roger. *A complete introduction to modern NMR spectroscopy*. New York, USA : John Wiley and Sons, 1998. 382 s. ISBN 0471157368. info
- Derome, Andrew E. *Modern NMR techniques for chemistry research*. Oxford : Pergamon, 1987. xvii, 280. ISBN 0-08-032513-0. info

C6815 Struktura a vlastnosti polymerů

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Přednáška

Metody hodnocení: Písemná a ústní zkouška

Literatura:

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

C6830 Radioekologie

Vyučující: [Mgr. Jiří Křivohlávek](#)

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

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen: pochopit roli ionizujícího záření a jaderných materiálů ve vědě, průmyslu a vojenství; znát historii objevu a použití ionizujícího záření a jaderných materiálů; bude znát negativní a pozitivní účinky ionizujícího záření na živé i neživé objekty; bude znát problematiku radioaktivních odpadů a emisí radioaktivních látek do životního prostředí;

Osnova:

- 1. Obecné pojmy
 - 1.1. Symbolika
 - 1.2. Pojmy
 - 1.3. Hmotnost atomu
 - 1.4. Energie
- 2. Radioaktivita
 - 2.1. Hmotnostní podmínka
 - 2.2. Druhy radioaktivních přeměn
 - 2.3. Kinetika radioaktivních přeměn
 - 2.4. Přírodní RN

- 3. Ionizující záření
- 3.1. Vlastnosti ionizujícího záření
- 3.2. Zdroje IZ
- 3.3. Ochrana před IZ
- 3.4. Detekce IZ
- 3.5. Biologické účinky IZ
- 4. Radioaktivita a ionizující záření v životním prostředí
- 4.1. Kosmické záření a kosmogenní RN
- 4.2. Přírodní RN s dlouhým poločasem přeměny
- 4.3. Radon
- 4.4. Jaderné elektrárny
- 4.5. Havárie jaderných reaktorů
- 4.6. Nehody při práci s radioaktivními látkami
- 4.7. Pokusné jaderné a termonukleární výbuchy
- 4.8. Umělé zdroje IZ
- 4.9. Radioaktivní odpady

Výukové metody: Přednáška a diskuze

Metody hodnocení: Přednáška, zkouška ústní či písemná.

Literatura:

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

C6850 Chromatografické metody II

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

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

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

Osnova:

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

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

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

Literatura:

- Poole, C. F. - Poole, S. K. *Chromatography Today*. 5th Impression. Amsterdam : Elsevier, 1997. ISBN 0-444-89161-7. info

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

C6860 Moderní metody analýzy organických polutantů

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Kurs je organizován formou přednáškyjednou týdně.

Metody hodnocení: ústní zkouška

Literatura:

- Fifield, F. W. - Haines, P. J. *Environmental Analytical Chemistry.* (Eds.). London : Blackie Academic & Professional, 1995. ISBN 0-7514-0052-1. info
- Skoog, Douglas A. - Leary, James J. *Principles of instrumental analysis.* 4th ed. Fort Worth : Saunders College Publishing, 1992. xii, 700 s. ISBN 0-03-023343-7. info

- Barceló, D. *Environmental Analysis. Techniques, Applications and Quality Assurance*. Amsterdam : Elsevier, 1993. Techniques & Instrumentation Anal. Chem., Vol. 13. ISBN 0-444-89648-1. info

C6950 Chemická exkurze

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Exkurze v zařízeních mimo Masarykovu univerzitu.

Metody hodnocení: Zápočet

Literatura:

doporučená literatura

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

C6960 Odborná praxe

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Odborná praxe v zařízeních mimo Masarykovu univerzitu.

Metody hodnocení: Zápočet

Literatura:

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

C7000 Oborový seminář I

Vyučující: [prof. RNDr. Mojmír Šob 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 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)

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 zářiče popsané Planckovým vyzařovacím zákonem), UV-RTG (brzdné záření). Plazmatické zdroje spojitého spektra IR-VIS-UV (výbojky D2, Xe). Zdroje čárového spektra VUV-UV-VIS (nízkotlaké výbojky) a RTG (rentgenky, (-zářiče, synchrotron). Polovodičové zdroje záření (LED). Zdroje koherentního záření (plynové, barvivové a polovodičové lasery). 3. Disperzní prvky pro kmitočtovou analýzu záření v oblasti IR-VIS-UV (hranoly, mřížky, interferometry). Monochromátory a polychromátory UV - VIS, optické uspořádání, vlastnosti. 4. Detektory záření UV-VIS založené na tepelných účincích (termočlánky), na vnějším a vnitřním fotoefektu (fotonky, fotonásobiče, fotorezistory, fotovoltaičné články). Plošné integrované detektory (CCD, CID..) 5. Atomová absorpční spektrometrie (AAS). Princip AAS, absorpční a emisní profily čar atomů, Bouger-Lamber-Beerův zákon v AAS. Atomizátory v AAS (plameny, elektrotermické atomizátory. Spektrální rušení, neselektivní absorpce záření, příčiny a metody korekce. Nespektrální interference. 6. Optická emisní spektrometrie UV-VIS (OES). Přehled metodik OES. Tepelná, elektronová a zářivá excitace molekul, atomů a iontů. Boltzmannův zákon. Ionizace a Sahaova rovnice. Excitační zdroje v OES. Teoretické základy emise a absorpce záření, Kirchhoffův zákon. Průběh závislosti emise záření na koncentraci analytu. 7. Plamenová emisní spektrometrie molekul a atomů (FES). Molekulová a atomová spektra. Instrumentace v FES: plameny, transport vzorku, separace a detekce záření. Spektrální a nespektrální interference. Analytické vlastnosti FES. 8. Oblouková a jiskrová OES, klasická varianta emisní spektrografie. Jiskrové a obloukové generátory, charakter obloukového a jiskrového spektra. Spektrografy s fotografickou detekcí, spektrometry s fotoelektrickou detekcí, kvantometry. Využití vakuové oblasti UV spektra. Analytické vlastnosti a oblast použití. 9. Indukčně vázané plazma (ICP) v OES. Princip funkce, excitační mechanismy v argonovém plazmatu ICP. Spektrální vlastnosti ICP z analytického hlediska, kalibrační závislosti, rozsah, linearita, Meze detekce. Spektrální interference a další rušivé vlivy v ICP OES. Hmotnostní ICP spektrometry. 10. Výboje za sníženého tlaku v OES. Izotermní a neizotermní plazma. Geisslerovy trubice a analýza plynů. Výboj v duté katodě, aplikace ve stopové a izotopové analýze. Grimmův výboj, spektrální vlastnosti a konstrukční uspořádání. Analýza povrchových vrstev a aplikace

v technické praxi. Hmotnostní spektrometry s neizotermním plazmatem. 11. Atomová fluorescenční spektrometrie. Princip metody, analytické parametry (citlivost, meze detekce, koncentrační rozsah). 12. Elementární analýza látek rentgenovými paprsky. Vznik primárního a fluorescenčního RTG záření. Serie čar a jejich symbolika, nezářivé pochody v atomech (sekundární a Augerovy elektrony). RTG fluorescenční 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

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, elektrodový děj, elektroaktivní částice, migrace, difúze, konvekce, stacionární děj, elektrochemický potenciál). Přenos elektronu, Fermiho energetická hladina. Klasifikace elektroanalytických metod. 2. Potenciometrie. Potenciál, elektromotorická síla (EMS), elektrodový potenciál, Nernstova rovnice, význam standardního potenciálu, způsoby měření EMS, pH- a pX-metry, indikační elektrody a referentní elektrody. Potenciometrické titrace, titrační křivky a několik způsobů jejich vyhodnocení. 3. Iontově selektivní elektrody - ISE. Definice a klasifikace ISE, elektrochemická membrána, transfer iontů, Donnanův a Nernstův potenciál, materiály membrán a konstrukce ISE, pevné a kapalně 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 přenesených elektronů, metoda určení tloušťky galvanických povlaků. Coulometrická titrace. 7. Polarografie a voltametrie. Klasická polarografie a voltametrie, princip, rtuťová kapající elektroda, nádobky, polarografy, anodicko-katodické zapojení, vyhodnocení polarografických křivek, polarografické proudy (difúzní, kapacitní, kinetický, katalytický, adsorpční), proudová maxima, rovnice reverzibilní katodické vlny a logaritmická analýza, derivační polarografie,

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

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

Metody hodnocení: Prezentace, ústní zkouška

Literatura:

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

C7280 Elektrodová kinetika

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 předmětu Elektrodová kinetika je seznámit studenty chemie: (a) s kinetikou elektrodových procesů na nabitěm fázovém rozhraní, (b) s různými typy elektroaktivních systémů za rovnovážných a nerovnovážných podmínek, (c) s vlivem experimentálních podmínek na rychlost elektrodových reakcí a (d) s kvantifikací elektrochemických dat, jejímž výsledkem je výpočet kinetických parametrů. Absolvent tohoto kurzu bude vybaven znalostmi pro hodnocení elektrodové kinetiky a vlivu různých parametru na ni.

Osnova:

- 1. Podstata elektrodových reakcí. Fermiho energetická hladina. Vliv potenciálu na Fermiho hladinu elektronů v kovu. Hraniční orbitály v redoxních reakcích. Termodynamika a kinetika. Metody studia elektrodových reakcí. 2. Rovnovážná elektrochemie. Vnitřní a vnější potenciál, elektrochemický a elektrodový potenciál, galvanický článek a jeho termodynamika, Nernstova rovnice, elektrochemická řada napětí, klasifikace elektrod, standardní elektrodový potenciál. 3. Pohyb iontů v roztoku (difúze a migrace), vodivost a pohyblivost, kapalinový potenciál, iontově selektivní elektrody a biomembrány. Chování roztoků elektrolytů při průchodu proudu. 4. Struktura mezifází elektroda - elektrolyt. Elektrická dvojrstva (ED) a její modely: Helmholtzův, Gouy- Chapmanův, Sternův, Grahamův model. Grahamova specifická adsorpce. Elektrokapilární maximum, diferenciální kapacita. Rozhraní kapalina-kapalina, rozhraní elektroda - elektrolyt. ED na monokrystalickém a polykrystalickém materiálu. Elektrokinetické jevy, zeta potenciál, elektroforéza a elektroosmóza. 5. Mechanismus přenosu elektronu: v homogenním prostředí (roztok) a v heterogenním prostředí (na rozhraní elektroda/roztok), vyjádření heterogenní rychlostní konstanty, výměnný proud, mikroskopická interpretace přenosu elektronu - Marcusova teorie, přepětí, Butlerova-Volmerova rovnice, koeficient přenosu náboje. 6.

Transport látek k elektrodě. Migrace, difúze, konvekce. Difúze, Fickovy zákony, limitní difúzní proud (planární a sférická difúze), polarizační přepětí, Nernstova difúzní vrstva. Konvekce a difúze: hydrodynamický systém, rotační disková elektroda. Rychlost řídicí děj (rate determining step rds). 7. Reverzibilní a ireverzibilní reakce, velikost heterogenních rychlostních konstant, Tafelův zákon, vliv ED a specifické adsorpce na elektrodovou kinetiku, rychlost elektrodové reakce, elektrodový proces bez a s chemickou reakcí, předřazená, vřazená a následná chemická reakce. Stupňovitost elektrodových dějů. 8. Hydrodynamické systémy a jejich význam při studiu elektrodových procesů, hydrodynamické elektrody s dvojným povrchem a jejich využití v nestacionárních technikách. 9. Kinetický parametr v jednotlivých elektroanalytických metodách. Možnosti využití potenciostatických a galvanostatických metod ke zkoumání elektrodových procesů. Kriteria reverzibility elektrodového děje. 10. Impedance, složky in phase a out of phase, sériový a paralelní RC obvod. Randlesův obvod, Warburgova impedance. Výpočet heterogenních rychlostních konstant z impedančních dat (elektrochemické impedanční spektrum EIS). 11. Elektrodové reakce klasifikované podle typů chemické reakce. Elektrosyntéza. Elektrodepozice a underpotential deposition. Bockrisův mechanismus elektrodepozitivního procesu kovů. Chemicky modifikované elektrody a polymerní elektrody. Koroze a její kinetika. 12. Ne-elektrochemické zkoušky elektrod a elektrodových procesů. Charakterizace elektrodových povrchů. In situ a ex situ spektroskopické techniky, in situ a ex situ mikroskopické techniky, jiné in situ techniky. Fotoelektrochemie, elektrochemiluminiscence.

Výukové metody: Přednáška. Absolvent tohoto kurzu bude vybaven znalostmi pro hodnocení elektrodových procesů na fázovém rozhraní elektroda/roztok.

Metody hodnocení: Povinně volitelný předmět pro studenty odborné chemie. Dvouhodinová jednosemestrální přednáška. Zkouška je ústní, doplněná testem.

Literatura:

- Atkins, Peter William. *Physical chemistry [Atkins, 1998]*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850102-1. info
- Brett, Christopher M. A. - Brett, Ana Maria Oliviera. *Electroanalysis*. Oxford : Oxford University Press, 1998. 88 s. ISBN 0-19-854816-8. info
- Fisher, A. C. *Electrode dynamics*. Oxford : Oxford University Press, 1996. 83 s. ISBN 0-19-855690-. 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

C7410 Struktura a reaktivita

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

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

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

Osnova:

- 1. Základní pojmy. Rozměr, čas, rychlost a energie v chemii. Vazba. Vnitřní parametry struktury a jejich deformace. Fyzikální vlastnosti sloučenin podmíněné polohou a dislokacemi atomových jader a změnami elektronové hustoty. Efekty substituentů. Prostředky k určování struktury. 2. Molekulové orbitály a reaktivita. Konstrukce molekulových orbitalů, Hückelova aproximace, korelační diagramy. 3. Stabilita molekul. Termochemické aditivní výpočty. Konformace acyklických a cyklických uhlovodíků. Vliv heteroatomu na konformační chování. Torzní a stereoelektronové efekty. Hyperkonjugace. Anomerní efekt. 4. Aromaticita. Antiaromaticita. Homoaromaticita. Aromatické ionty a dipóly. Polycyklické aromatické sloučeniny. Aromatický charakter TS pericyklických reakcí. 5. Nekovalentní interakce a solvatace. Chemie v plynné a kapalně fázi. Roztoky. Iontové páry. Hughesův-Ingoldův model. Vodíková vazba. pi-Interakce. Hydrofobní efekt. Molekulární rozpoznávání. 6. Kyseliny a zásady. Acidobazické rovnováhy ve vodném i nevodném prostředí a v plynné fázi. Aciditní funkce. Vliv substituentů na sílu Brønstedových kyselin a zásad. Kinetická kyselost. 7. Popis chemické reaktivity. Tvrdé a měkké kyseliny, báze, nukleofily a elektrofilny (teorie HSAB). Rychlostní konstanty a teorie tranzitního stavu. Aktivace a hnací síla chemických reakcí. Aktivační entalpie a entropie. Kinetika cyklizačních reakcí. Hammondův postulát. Bellův-Evansův-Polanyiho princip. O'Ferrallovy-Jencksovy diagramy. Curtinův-Hammettův princip. 8. Termodynamika a kinetika jako prostředky ke studiu mechanismů chemických reakcí. Vztah pro Gibbsovu energii (LFER): Hammettova rovnice. Taftova rovnice. QSAR. Kinetické izotopové efekty. 9. Katalýza. Specifická a obecná acidobazická

katalýza. Brønstedova korelace. Termodynamický cyklus. Heterogenní katalýza. Katalýza s přenosem mezi fázemi. 10. Přenos elektronu. Ionizační potenciál, elektronová afinita a charge-transfer (CT) komplexy. Marcusova teorie. Reakce ve vnitřní a vnější sféře. Přenos elektronu v SN2 a SRN1 reakcích. 11. Fotochemie. Excitace elektromagnetickým zářením. Přechody mezi elektronovými stavy. Zářivé a nezářivé procesy. Přenos energie. Studium mechanismů fotoreakcí. 12. Neklasické aktivace chemických reakcí. Spinová chemie: Efekt magnetického pole (MFE) a magnetický izotopový efekt (MIE). Mikrovlnná chemie. Sonochemie. Mechanochemie. Radiační chemie. Plazmová chemie.

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: 1 závěrečný písemný test + ústní zkouška.

Literatura:

povinná literatura

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

neurčeno

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

C7670 Izotopové metody

Vyučující: [Mgr. Jiří Křivohlávek](#)

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Přednáška a diskuze

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

Literatura:

doporučená literatura

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

C7680 Izotopové metody - laboratorní cvičení

Vyučující: [Mgr. Jiří Křivohlávek](#)

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Laboratorní cvičení

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

Literatura:

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

C7700 Chemie nekovů

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

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

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

Osnova:

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

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

Výukové metody: Výuka formou přednášky

Metody hodnocení: Ústní zkouška nebo kolokvium.

Literatura:

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

C7777 Zacházení s chemickými látkami

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

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

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

Osnova:

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

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

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

Literatura:

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

C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I

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

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

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

Osnova:

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

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

Výukové metody: přednáška, diskuze

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

Literatura:

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

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: praktické cvičení

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

Literatura:

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

C7895 Hmotnostní spektrometrie biomolekul

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

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

Cíle předmětu: Student získá základy hmotnostní spektrometrie: ionizační metody, hmotnostní 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 analyzátor. Iontový cyklotron (FT-ICR-MS). Iontová past (IT). Lineární past (LT). Orbitrap. Time-of-Flight hmotnostní spektrometr (TOFMS). Kolizně indukovaná disociace (CID). Tandemová MS (MS/MS). Principy vakuové techniky. Detektory a detekční elektronika. 4. Aplikace MS: Proteiny a peptidy. Mapování peptidů, proteinové databáze. DNA. Sacharidy. Syntetické polymery.

Výukové metody: Přednášky a závěrečná diskuse.

Metody hodnocení: Závěrečná ústní zkouška (česky nebo anglicky)

Literatura:

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

C7995 Advanced Methods of Biomolecular NMR

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

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

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

Osnova:

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

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

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

Literatura:

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

C7999 Advanced Methods of NMR Spectroscopy

Vyučující:

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Laboratory training and class discussion.

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

Literatura:

doporučená literatura

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

C8000 Oborový seminář II

Vyučující: [prof. RNDr. Mojmir Šob 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 samostatné výzkumné činnosti a bude si uvědomovat etické aspekty vědecké práce.

Osnova:

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

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

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

Literatura:

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

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

C8102 Speciální metody - laboratorní cvičení

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

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

Cíle předmětu: Hlavním cílem kurzu je osvojení si praktických dovedností v elektroanalytických metodách, metodách optické spektroskopie, hmotnostní spektroskopie a separačních analytických metodách. A) Moderní elektroanalytické metody, potenciometrie s iontově selektivní elektrodou, eliminační a rozpouštěcí voltametrie. B) UV/VIS spektrofotometrie, atomová absorpční spektrometrie (AAS), atomová emisní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem (ICP-OES), spektrometrie s využitím laseru (LA-ICP-OES a LIBS). C) Izotachoforéza, kapalinová chromatografie HPLC, kapilární zónová elektroforéza, hmotnostní spektrometrie s průletovým analyzátozem a laserovou desorpční/ionizační typu "matrix assisted" (MALDI-TOF-MS).

Osnova:

- A) Úvod do laboratorního cvičení: elektroanalytické metody, spektroskopie, separační metody. B) BLOK ELEKTROANALYTICKÉ METODY: 1. Stanovení dusičnanů iontově selektivní elektrodou v přítomnosti interferujícího iontu. S využitím Nikolského vztahu metodou separačních roztoků a metodou konstantní koncentrace interferenty stanovení konstanty selektivity interferujícího iontu. 2. Analytické využití nové elektrochemické metody eliminační voltametrie (EVLS) ve spojení s adsorptivním strippingem - separace potenciálově blízkých signálů (na různých elektrodách jsou sledovány redukce a oxidace vybraných depolarizátorů). C) BLOK SPEKTRÁLNÍ METODY 3. UV/VIS molekulová spektroskopie. Vicesložková spektroskopická a kinetická analýza. 4. Atomová absorpční spektrometrie s elektrotermickou atomizací. 5. ICP OES spektrometrie. Tvorba metody, výběr emisních čar, výběr pozadí, kalibrace, analýza reálného vzorku. Stanovení excitační teploty v ICP výboji z Boltzmanova zákona s použitím emisních intenzit čar železa a metodou 2 čar. Výpočet průměrné koncentrace elektronů v ICP výboji ze Starkova rozšíření čáry H 486,1 nm 6. Laserová ablace (LA). Spojení LA s optickou spektrometrií indukčně vázaného plazmatu (LA-ICP-OES) a s hmotnostní spektrometrií indukčně vázaného plazmatu (LA-ICP-MS). Spektrometrie laserem buzeného plazmatu (LIBS). Optimalizace parametrů laserové ablace. Sestrojení kalibračních závislostí pro vybrané prvky a analýza reálného vzorku. D) BLOK SEPARAČNÍ METODY 7. Stanovení aniontů ve vodách chronopotenciometricky a metodou ITP 8. Kapalinová chromatografie. HPLC - Stanovení obsahu inosinu, adenosinu a jejich 2'-deoxy-forem v modelové směsi – optimalizace a validace metody. 9. Polyakrylamidová gelová elektroforéza za denaturujících podmínek (SDS-PAGE). Separace proteinů v diskontinuálním systému GE s následnou vizualizací CBB R 250 a stříbrem. Identifikace modelových proteinů v jejich směsi. 10. CE-LIF, kapilární zónová elektroforéza s laserem indukovanou fluorescenční detekcí. Optimalizace experimentální sestavy. Stanovení meze detekce rhodaminu 6G. Separace rhodaminových barviv. 11. Hmotnostní spektrometrie proteinů a peptidů pomocí laserové desorpce/ionizace za účasti matrice (MALDI MS). Vybrané aplikace MALDI MS: kalibrace přístroje, stanovení molekulových hmotností, enzymatické štěpení, peptidové mapování, identifikace neznámého proteinu.

Výukové metody: laboratorní cvičení

Metody hodnocení: Laboratorní cvičení probíhá ve třech uzavřených cyklech: elektroanalytické metody, optické 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:

doporučená literatura

- Dvořák, Jiří - Koryta, Jiří. *Elektrochemie [Dvořák, 1983]*. 3. dopl. a rozš. vyd. Praha : Academia, 1983. 410 s. info
- Sommer, Lumír. *Analytická spektrometrie. 1.* 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1986. 173 s. info
- Churáček, Jaroslav. *Úvod do vysokoúčinné kapalinové kolonové chromatografie.* 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1984. 188 s. 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. *Analytická separace látek.* 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1990. 384 s. ISBN 80-03-00569-8. info

- Sommer, Lumír. *Teorie a praxe vybraných optických analytických metod*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1978. 285 s. info
- *Nové směry v analytické chemii. Svazek II*. Edited by Jaroslav Zýka. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1984. 218 s. info
- Holzbecher, Závaš - Churáček, Jaroslav. *Analytická chemie [Holzbecher, 1987]*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1987. 663 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
- Bartušek, Miloš. *Úvod do elektroanalytických metod*. 1. vyd. Praha : SPN, 1984. 104 s. : i. 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
- Koryta, Jiří. *Současné trendy v elektrochemii*. 1. vyd. Praha : Academia, 1986. 128 s. info
- *Analytická příručka. Díl II [Zýka, 1988]*. Edited by Jaroslav Zýka. 4. upr. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1988. 831 s. info
- Churáček, Jaroslav - Jandera, Pavel. *Separace látek : kapalinná vysokoúčinná kolonová chromatografie*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1981. 140 s. info
- *Nové směry v analytické chemii. Svazek I*. Edited by Jaroslav Zýka. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1983. 199 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

neurčeno

- Churáček, Jaroslav. *Nové trendy v teorii a instrumentaci vybraných analytických metod*. Vyd. 1. Praha : Academia, 1993. 387 s. ISBN 80-200-0010-0. info

C8400 Kvantová chemie pevných látek, výpočty elektronové struktury

Vyučující: [prof. RNDr. Mojmír Šob DrSc.](#)

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

Cíle předmětu: Přednáška se týká základů teorie a výpočtů elektronové struktury pevných látek. Nejprve jsou probírány principy a základní vztahy, v další fázi je pozornost věnována moderním metodám výpočtů elektronové struktury a jejich aplikací včetně magnetismu, strukturní stability, mechanických vlastností, fázových diagramů a mnohoúrovňového modelování atomové konfigurace rozlehlých poruch v pevných látkách. Závěr přednášky se zabývá strukturou a vlastnostmi nanokrystalických materiálů. Po absolvování tohoto kursu bude student schopen: rozumět souvislostem technicky významných vlastností pevných látek s jejich elektronovou strukturou; provádět výpočty elektronové struktury pro jednodušší systémy; použít výsledků těchto výpočtů pro analýzu souvislosti mezi strukturou a vlastnostmi pevných látek.

Osnova:

- Přehled základních pojmů kvantové fyziky a chemie: vlnová funkce, hustota pravděpodobnosti, Schrödingerova rovnice, analýza jednoduchých kvantových systémů. Základy prvopřincipiálního přístupu k elektronové struktuře pevných látek: Schrödingerova rovnice pro pevnou látku, Born-Oppenheimerova aproximace, teorie funkcionálu hustoty, funkcionál výměnné a korelační energie, jeho lokální aproximace. Princip metod výpočtů elektronové struktury a jejich přehled (APW, OPW, LCAO, KKR, LMTO, LAPW, pseudopotenciály, KKR). Blochův teorém, aproximace těsné vazby. Úloha Greenových funkcí v teorii pevných látek, vyjádření lokální hustoty stavů a nábojové hustoty pomocí Greenových funkcí. Praktická ukázka výpočtů elektronové struktury metodou LMTO pro tranzitivní kovy: pásová struktura, hustota stavů, totální energie, struktury s vyšší energií, polymorfismus kovů. Výpočty elektronové struktury neuspořádaných slitin: aproximace koherentního potenciálu, příklady výsledků pro kubické a hexagonální slitiny. Výpočty elektronové struktury povrchů a rozhraní: principiální vrstva, povrchová Greenova funkce, příklady výsledků pro povrchy a hranice zrn v tranzitivních kovech. Magnetismus pevných látek: jeho původ, popis elektronových stavů, Heisenbergův a Stonerův model magnetismu. Přehled základních typů magnetického chování látek (dia-, para-, fero- a antiferomagnetismus). Magnetické vlastnosti kovových multivrstev: základní vlastnosti a použití kovových multivrstev, magnetická anizotropie, výměnné interakce mezi vrstvami (interlayer exchange coupling), gigantická magnetorezistence. Význam totální energie pro studium stability a mechanických vlastností materiálů: existence struktur s vyšší energií a polymorfismus, modelování konfigurace rozlehlých defektů, teoretická pevnost materiálů. Multiscale modelling: od

elektronových a atomárních rozměrů přes mesoskopickou úroveň k mechanice kontinua. Příklad: křehký lom a šíření trhliny. Využití výpočtů elektronové struktury pro konstrukci fázových diagramů kovových systémů, metoda CALPHAD. Elektronová struktura a atomová konfigurace nanokrystalických materiálů. Příklad struktury nanokrystalického niklu. Úloha výpočtů elektronové struktury v současné fyzice a chemii pevných látek a v materiálovém výzkumu.

Výukové metody: Přednáška doprovázená konzultacemi, řešení specifických úloh vztahujících se k probíraným tématům.

Metody hodnocení: Předmět je zakončen ústní zkouškou. Během semestru je vyžadováno samostudium vybraných partií týkajících se elektronové struktury pevných látek. Povinnost navštěvovat výuku není stanovena.

Literatura:

- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info
- Atkins, P. W. *Fyzikálna chémia*. 6. vyd. Bratislava : Slovenská technická univerzita v Bratislave, 1999. 308 s. ISBN 80-227-1238-8. info
- *Electronic structure and the properties of solids : the physics of the chemical bond : Elektronnaja struktura i svojstva tverdyh tel : fizika chimičeskoj svjazi. T. 2.* info
- Springborg, Michael. *Methods of electronic-structure calculations : from molecules to solids*. Chichester : John Wiley & Sons, 2000. x, 501 s. ISBN 0-471-97976-7. info
- Sutton, Adrian P. *Electronic structure of materials*. Oxford : The Clarendon Press, 1993. xv, 260 s. ISBN 0-19-851754-8. info
- Harrison, Walter A. *Electronic structure and the properties of solids : the physics of the chemical bond*. 1st pub. New York : Dover Publications, 1989. xv, 586 s. ISBN 0-486-66021-4. info
- Foresman, J B - Frisch, A. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. Pittsburgh : Gaussian, Inc., 1996. info
- *Electronic structure and the properties of solids : the physics of the chemical bond (Orig.) : Elektronnaja struktura i svojstva tverdyh tel : fizika chimičeskoj svjazi. T. 1.* info

C8500 Mechanismy organických reakcí

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: 1 písemný test + ústní zkouška

Literatura:

- E. V. Anslyn, D. A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, Sausalito, California 2005. ISBN 1-891389-
- A: Jurášek: Fyzikálne princípy a mechanizmy organických reakcií. Veda, Bratislava 1989.
- O. Červinka: Mechanizmy organických reakcií. SNTL/ALFA, Praha 1981.

C8510 Mechanizmy organických reakcí - seminář

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: Účast studentů na semináři a vypracování úkolů.

Literatura:

- E. V. Anslyn, D. A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, Sausalito, California 2005. ISBN 1-891389-9
- A: Jurášek: Fyzikálne princípy a mechanizmy organických reakcií. Veda, Bratislava 1989.
- O. Červinka: Mechanizmy organických reakcií. SNTL/ALFA, Praha 1981.

C8700 Technologie chemických výrob

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Přednáška

Metody hodnocení: zkouška písemná a ústní

Literatura:

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

C8780 Organic Photochemistry

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

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

Cíle předmětu: The main objective of the course is making students aware of basic photochemistry and photophysics. The course discusses the chemistry that follows the absorption of electromagnetic radiation. It explains the extraordinary influence of visible or ultraviolet light on structural changes and chemical behaviour of organic compounds. The course covers applied photochemistry; i.e. photochemical applications in the industry, medicine and biology. Common photochemical transformations in nature are also discussed.

Osnova:

- 1. Introduction to photochemistry. History. Calibration points: energetics and dynamics. Excited states and their fates. Jablonski diagram. Photophysical and photochemical processes. Lambert-Beer law. Quantum yield. Electronic configurations. Selection rules. 2. Radiation processes. Absorption. Emission. Frack-Condon law. 3. Radiationless processes. Intersystem crossing. El-Sayed rules. Vibrational relaxation. 4. Mechanistic and experimental photochemistry. Rate constants. Quantum yields. Actinometry. Stern-Volmer dependence. State diagrams. Experimental photochemistry: light sources, photoreactors, flash photolysis. Safety. 5. Electron and energy transfer. Excimers. Exciplexes. Marcus theory. Electron transfer. Energy transfer. 6. Alkenes and alkynes. E-Z isomerization. Electrocyclic and sigmatropic photorearrangement. di-pi-Methane photorearrangement. Photoinduced

nucleophile, proton, and electron addition. Photocycloaddition reaction. 7. Aromatic compounds. Photorearrangement. Phototransposition. Photocycloaddition. Photosubstitution. 8. Oxygen compounds. Photoreduction. Oxetane formation (Paternò-Büchi Reaction). Norrish type I and II reactions. Photoenolization. Addition and hydrogen/electron transfer reaction. 9. Nitrogen compounds. E–Z isomerization. Photofragmentation. Photorearrangement. Photoreduction. 10. Sulphur compounds. Hydrogen abstraction. Cycloaddition. Photofragmentation. 11. Halogen compounds. Photohalogenation. Photofragmentation. Photoreduction. Nucleophilic photosubstitution. 12. Molecular oxygen. Ground state and excited state oxygen. Photooxygenation. Ene reaction. 13. Photosensitizers, photoinitiators and photocatalysts. Organic and transition-metal species

Výukové metody: Teoretická příprava.

Metody hodnocení: 1 závěrečný písemný test.

Literatura:

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

C8800 Rtg strukturní analýza

Vyučující: [doc. RNDr. Jaromír Marek Ph.D.](#)

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

Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět a vysvětlit základní principy monokrystalové rtg. strukturní analýzy. Kromě teorie monokrystalové difrakce se zde ale věnujeme i přístroj. výbavě používané při difrakčním experimentu a metodám používaným při vyhodnocování experimentálních dat. Na rozdíl od analogického kursu CB070 Proteinová krystalografie je základní pozornost kursu C8800 soustředěna na krystalografii tzv. malých molekul.

Osnova:

- Symetrie látek
- Interakce rtg. záření s látkou
- Difrakce na krystalu
- Zdroje a detektory rtg. záření
- Difraktometry
- Fázový problém
- Pattersonovské a přímé metody
- Upřesňování modelu, R-faktory, metoda nejmenších čtverců.
- Programy SHELXS a SHELXL
- Příprava proteinových krystalů
- Proteiny a metody kovových derivátů
- Upřesňování proteinových strukturních modelů
- Krystalografické databáze

Výukové metody: Teoretická příprava. Domácí práce prováděná na počítači.

Metody hodnocení: Během semestru je vyžadována domácí práce na počítači. Ústní zkouška či kolokvium

Literatura:

- Marek, Jaromír - Trávníček, Z. *Monokrystalová rentgenová strukturní analýza*. první. Olomouc : Vydavatelství Univerzity Palackého, 2002. 169 s. nedělit se na edice. ISBN 80-244-0551-2. info
- Giacovazzo, C. *Fundamentals of Crystallography*. 1992. ISBN 0-19-855578-4. info

C8810 Chemie přechodných prvků

Vyučující: [doc. RNDr. Josef Novosad CSc.](#)

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

Cíle předmětu: Přednáška podává přehled obecných zákonitostí, které tvoří základ systematické chemie d- a f-prvků. Těžiště spočívá v diskusi struktury, vazebných poměrů, termodynamiky a spektrálních údajů a nalezení souvislostí s chemickým chováním přechodných prvků. Na konci tohoto kurzu by měl být student schopen

porozumět a vysvětlit syntézy a reaktivity sloučenin přechodných kovů, strukturní a vazebné poměry a jejich důsledky. Absolventi kurzu by navíc měli získat přehled o systému anorganických sloučenin přechodných kovů, metodách jejich přípravy a reaktivity.

Osnova:

- 1. Koordinační sloučeniny, typy ligandy a jejich klasifikace, koordinační čísla. 2. Vazba v koordinačních sloučeninách, teorie ligandového pole. 3. Stereochemie koordinačních sloučenin. 4. Izomerie koordinačních sloučenin, stereochemicky nerigidní molekuly a ionty. 5. Obecné periodické trendy u přechodných kovů. Skupina 11-mincovní kovy. 6. 12. skupina periodického systému (zinek, kadmium, rtuť). 7. Přechodné kovy 3. skupiny a vzácné zeminy, lanthanoidová kontrakce. 8. Přechodné kovy 4. skupiny (titan, zirkonium, hafnium) 9. Přechodné kovy 5. skupiny (vanad niob, tantal). 10. Přechodné kovy 6. skupiny (chrom, molybden, wolfram) a 7. skupiny (mangan, technecium, rhenium). 11. Isopoly- a heteropolyanionty. 12. Triáda železa. 13. Platinové kovy. 14. Dvojjaderné komplexy s násobnými vazbami kov-kov. 15. Klastry s vazbami kov-kov.

Výukové metody: Výuka formou přednášky.

Metody hodnocení: Ustní zkouška.

Literatura:

- Greenwood, N. N. - Earnshaw, A. *Chemistry of the elements (Orig.) : Chemie prvků. Sv. 1 : Chemie prvků. Sv. 2.* info
- Cotton F.A., Murillo C., Wilkinson G., Bochmann M., Grimes R.: *Advanced Inorganic Chemistry*, 6th Ed., Wiley-Interscience, New York 1999.
- Housecroft C. E.: *The Heavier d-Block Metals*, Oxford Univ. Press, Oxford 1999.
- Jones CH. J.: *d- and f-Block Chemistry*, Royal Society of Chemistry, Cambridge 2001

C8820 Metody studia rovnováh a kinetiky reakcí

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

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř 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 for complexation of selected compounds; On the base of knowledge gained be able to propose experiments to solve unknown systems; to obtain skills for 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 optimalizační 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

C8845 Modelování chemických systémů v roztocích

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

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

Cíle předmětu: Hlavním úkolem předmětu je, aby se studenti seznámili a pochopili význam speciálního modelování, s vyhledáváním v příslušných databázích a obsluhou jednotlivých programů pro speciální výpočty. Cílem přednášky je taktéž zpřístupnění studijní literatury, databází a software pro široké použití ve výzkumu a praxi nových rychle se rozvíjejících oborů chemie (např. bioanalytická chemie, materiálová chemie, chemie životního prostředí, aj.).

Osnova:

- 1. Úvod. Význam modelování pro výzkum a praxi. Speciace - definice, příklady použití. 2. Teoretický základ pro modelování chemických dějů ve vodných roztocích. 3. Popis chemických dějů v roztocích (acidobazické, srážecí, komplexotvorné a redoxní rovnováhy a kinetika). 4. Ionty kovů v roztocích. 5. Použití termodynamických a kinetických dat pro modelování. Seznámení se s termodynamickými databázemi. 6. Vliv vnějších podmínek na termodynamická a kinetická data (teplota, iontová síla, tlak, aj.). 7. Rovnováhy v roztocích polyelektrolytů. Příklady (modely protonizace a komplexace iontů kovů pro bioligandy, např. cukry, ligniny, fulvové a huminové kyseliny). 8. Rovnováhy na mezifázi kapalina-plyn, roztok-pevná fáze. Příklady (křemičitany, uhličitany, aj.). 9. Experimentální metody pro stanovení rovnovážných koncentrací různých forem prvků (speciace). 10. Numerické metody pro výpočet rovnovážných koncentrací a jejich aplikace pro výpočet speciace za rovnovážných a nerovnovážných podmínek. 11. Demonstrace software pro výpočty.

Výukové metody: Teoretická příprava

Metody hodnocení: kombinace přednášky s praktickým ukázkami na počítači ústní zkouška

Literatura:

- 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
- Grenthe, I., Puigdomenech, I. (Eds.), *Modelling in Aquatic Chemistry*, OECD NEA Paris 1997.
- Pitter, Pavel. *Hydrochemie [Pitter, 1999]*. 3. přeprac. vyd. Praha : Vydavatelství VŠCHT, 1999. 568 s. ISBN 80-03-00525-62. info

C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Přednášky kombinované s diskusí nad projekty.

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

Literatura:

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

C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení

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

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

Cíle předmětu: Samostatný projekt v pokročile vypočetní chemii.

Osnova:

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

Výukové metody: Práce na projektu.

Metody hodnocení: Diskuse o projektu, protokol

Literatura:

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

C8880 Vybrané metody analýzy pevných látek

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

Rozsah: 1/0/0. 1 kr. (příř 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. Pallechi - 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

C8950 NMR - Strukturální analýza

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

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

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

Osnova:

- **1. Některé aspekty NMR** - úvod, metody magnetické rezonance, vznik NMR signálu, typy jaderných interakcí, chemický posun, interakční konstanta, příklady, Fourierova transformace - relaxace jader (inversion recovery), selektivní excitace, potlačení signálu rozpouštědla, NOE; **2. Konstrukce spektrometrů** - magnety, sondy, kyvety a propojení s HPLC, MS; **3. Editační techniky** - spinové echo, APT - přenos polarizace, INEPT, DEPT; **4. NMR spektroskopie ve více dimenzích - homonukleární korelace** - korelační spektroskopie (COSY) - interakce dalekého dosahu (LR-COSY, Relayed COSY) - TOCSY; **5. Heteronukleární korelace** - jednovazebné (HETCOR) - dalekého dosahu (LR-HETCOR, COLOC); **6. Měření J konstant** - J spektroskopie - jiné techniky-korelace chemických posunů, časová doména; **7. Interakce dipól-dipól** - selektivní NOE - 2D NOESY; **8. Vícekvantová spektroskopie** - MQF-COSY - INADEQUATE; **9. NMR spektroskopie jiných jader než ¹H a ¹³C** - ¹⁵N, ³¹P, ⁷⁷Se (¹⁹F, ²⁹Si, ¹¹¹Cd a ¹¹³Cd, ¹¹⁷Sn a ¹¹⁹Sn, ¹²⁵Te, ¹⁹⁵Pt a ²⁰⁷Pb); **10. Inverzní experimenty** - jednovazebné (HMQC, HSQC) - dalekého dosahu (HMBC, HSQC) - kombinované techniky (HMQC-TOCSY, HSQC-TOCSY, HSQC-NOESY); **11. Gradientní NMR spektroskopie** - homokorelační spektroskopie - NOESY - heterokorelační inverzní metodiky; **12. Nepřímá spin-spinová interakce a přímá interakce dipól-dipól - informace pro řešení prostorové struktury molekul** - J konstanty a informace o dihedrálních úhlech - NOE a meziatomové vzdálenosti - vstupní data pro molekulovou mechaniku; **13. Praktické aspekty** - typy sond, logická struktura analýzy, citlivost experimentů; **14. Praktické příklady a interpretace spekter**

Výukové metody: Přednášky

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

Literatura:

povinná literatura

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

doporučená literatura

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

neurčeno

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

C9000 Oborový seminář III

Vyučující: [prof. RNDr. Mojmír Šob 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 diplomové 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)

C9530 Strukturní biochemie

Vyučující: [doc. Mgr. Lukáš Židek Ph.D.](#)

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

Cíle předmětu: Cílem přednášky je poskytnout základní informace o určování struktury biomakromolekul (zejména proteinů a nukleových kyselin). Je koncipována jako obecný přehled určený studentům, kteří se nechtějí v tomto oboru specializovat, ale může posloužit i jako úvod k pokročilým kurzům strukturní analýzy. Studenti, kteří úspěšně ukončí kurz budou schopni aplikovat metody prohledávání databází struktur, analyzovat strukturní modely, rozhodovat, která metoda určování struktury je vhodná pro daný případ a pochopit základní principy určování struktur a analýzy výchozích dat.

Osnova:

- 1-4. Pojem struktury makromolekul, základní strukturní motivy proteinů, nukleových kyselin, struktura sacharidů a membrán. 5. Výpočetní metody, molekulová mechanika a dynamika, simulované žihání. 6. Příprava vzorku, sekvenace nukleových kyselin, proteinů a sacharidů. 7. Optické metody charakterizace biomakromolekul: cirkulární dichroismus, infračervená spektroskopie. 8-9. Rentgenová strukturní analýza. Příprava krystalů, difrakční experiment, metody řešení fázového problému, mapy elektronové hustoty, výstavba strukturního modelu. 10-11. Nukleární magnetická rezonance. Izotopové značení,

NMR experiment, přiřazení frekvencí ve spektrech, určení geometrie (NOE, interakční konstanty), dynamika proteinů. 12. Databáze struktur, bioinformatika, počítačové předpovídání a modelování.

Výukové metody: Základní principy jsou vysvětleny v přednáškách doplněných prezentací modelových příkladů a otevřených diskusí. Všechny přednášky jsou shrnuty a rozšířeny o další příklady v elektronické učebnici, poskytované studentům zdarma.

Metody hodnocení: "Ústní" zkouška se skládá ze dvou částí, praktických úkolů (řešených formou testu) a bezprostředně navazující ústní diskuse se zkoušejícím. Hodnocení vychází zejména (z 80 %) z praktické části. Během řešení praktických úloh a přípravy na diskusi je povoleno používat přinesenou literaturu, poznámky, informace z internetu, je však vyžadováno samostatné řešení. K přípravě na praktickou část slouží cvičení C9531.

Literatura:

- Lesk, Arthur M. *Introduction to protein architecture :the structural biology of proteins*. New York : Oxford University Press, 2001. xii, 347 s. ISBN 0-19-850474-8. info
- Finkelstein, Alexei V. - Ptitsyn, O. B. *Protein physics :a course of lectures*. Amsterdam : Academic Press, 2002. xix, 354 s. ISBN 0-12-256781-1. info
- Daune, Michel. *Molecular biophysics : structures in motion*. Oxford : Oxford University Press, 1999. xxii, 499. ISBN 0-19-857783-4. info
- Marek, Jaromír - Trávníček, Z. *Monokrystalová rentgenová strukturní analýza*. první. Olomouc : Vydavatelství Univerzity Palackého, 2002. 169 s. nedělí se na edice. ISBN 80-244-0551-2. info
- Rhodes, Gale. *Crystallography made crystal clear :a guide for users of macromolecular models*. 2nd ed. San Diego, Calif. : Academic Press, 2000. xix, 269 s. ISBN 0-12-587072-8. info
- *Protein NMR spectroscopy :principles and practice*. Edited by John Cavanagh. 2nd ed. Amsterdam : Elsevier, 2007. xxv, 885 s. ISBN 978-0-12-164491. info
- Attwood, Teresa K. - Parry-Smith, David J. *Introduction to bioinformatics*. 1st pub. Essex : Longman, 1999. xx, 218 s. ISBN 0-582-32788-1. info

C9920 Úvod do kvantové chemie

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

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

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

Osnova:

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

Výukové metody: Přednášky, diskuse v hodině, konzultace.

Metody hodnocení: ústní zkouška.

Literatura:

- Lowe, John P. *Quantum chemistry*. 2nd ed. San Diego : Academic Press, 1993. xx, 711 s. ISBN 0-12-457555-2. info

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

C9930 Metody kvantové chemie

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

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

Cíle předmětu: Tento předmět v návaznosti na kurz C9920 doplňuje a prohlubuje základy metod kvantové chemie a dále se zaměřuje na strategie analýzy výsledků kvantově-chemických výpočtů. Důraz je kladen především na různé přístupy k analýze rozložení elektronové hustoty v rámci jednelektronových přístupů (kanonické MO, NBO). Nově se kurz věnuje i technikám optimalizace geometrie stejně jako strategiím zahrnutí dynamiky a solvatace. Cíle: osvojení základů metod QCH, pochopení postupu při výpočtu konkrétních molekulových vlastností, interpretace výsledků.

Osnova:

- (1) Postuláty kvantové mechaniky. (2) Poruchové přístupy v kvantové chemii. (3) Metoda spřažených klastrů (CC). (4) Symetrie molekul a její využití v QCH výpočtech. (5) Molekulové vlastnosti: teorie. (6) Molekulové vlastnosti: ilustrace konceptů. (7) Techniky optimalizace geometrie. (8) Simulace a modely solventu. (9) Vlnová funkce: populační analýza - klasické přístupy, model AIM. (10) Přirozené orbitály (NBO) a na nich založená populační analýza. (11) Chemické koncepty v NBO schématu, analýza MO příspěvků k daným vlastnostem, interpretace MO energií a tvarů. (12) Ilustrace na konkrétních výzkumných projektech, shrnutí.

Výukové metody: Přednášky vč. diskuse, konzultace.

Metody hodnocení: Používané výukové metody: přednášky, diskuse v hodině, prezentace výsledků vlastního výzkumu a diskuse o nich, domácí úkoly, četba z vybrané literatury. Požadavky pro ukončení: Ústní zkouška

Literatura:

- *Quantum chemistry*. Edited by Ira N. Levine. 6th ed. Upper Saddle River, N.J. : Prentice Hall, 2009. x, 751 s. ISBN 9780136131069. info
- Lowe, John P. *Quantum chemistry*. 2nd ed. San Diego : Academic Press, 1993. xx, 711 s. ISBN 0-12-457555-2. info
- Pilar, Frank L. *Elementary quantum chemistry*. 2nd ed. New York : McGraw-Hill Publishing Company, 1990. xvi, 599 s. ISBN 0-07-050093-2. info
- Koch, Wolfram - Holthausen, Max C. *A chemist's guide to density functional theory*. 2nd ed. Weinheim : Wiley-VCH, 2002. xiii, 300. ISBN 3-527-30422-3. info

F7460 Fyzika pevných látek pro nefyzikální obory

Vyučující: [prof. RNDr. Václav Holý CSc.](#)

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

Cíle předmětu: V přednášce jsou podány základní informace o fyzice pevných látek s důrazem na vlastnosti nositelů náboje (pásová struktura, elektronový plyn), transportní vlastnosti kovů a polovodičů a optické vlastnosti dielektrik.

Osnova:

- 1. Krystalová struktura Prostorová mřížka, Bravaisovy mřížky, těsné uspořádání krystalová mřížka, reciproká mřížka. Strukturní poruchy - bodové poruchy, dislokace, vrstevné chyby, difrakce elektronů a rtg záření na krystalové mřížce RHEED, TEM 2. Povrchy pevných látek Krystalografie povrchu povrchová rekonstrukce rozptyl elektronů od povrchu pevné látky, LEED rozptyl iontů, SIMS, RBS 3. Elektrony v pevných látkách Drudeho model elektronového plynu, elektrická a tepelná vodivost elektronového plynu Sommerfeldův model, Fermiho koule, hustota stavů Elektrony v periodickém potenciálu, pásová struktura Fermiho plocha 4. Kmity krystalové mřížky Klasický popis harmonického krystalu, akustické a optické fonony interakce fononů s elmag. polem, polaritony Elementy kvantového popisu, Debyeho model Optické metody: IR absorpce, Ramanův rozptyl 5. Polovodiče Základní vlastnosti polovodičů Základy polovodičové technologie - růst krystalů, zonální tavba, oxidace, difuze p-n přechod 6. Základní vlastnosti dielektrik dielektrika a feroelektrika, piezoelektricitá, statická

permitivita, optické vlastnosti dielektrik, barevná centra 7. Kovy fázové diagramy, mechanické vlastnosti kovů a slitin, strukturní defekty v kovech, jejich vliv na mechanické vlastnosti

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

Metody hodnocení: Přednáška, písemná zkouška

Literatura:

- Dekker, Adrianus J. *Fyzika pevných látek [Dekker, 1966]*. Praha : Academia, 1966. 543 s. info
- Kittel, Charles. *Úvod do fyziky pevných látek : Introduction to solid state physics (Orig.)*. 1. vyd. Praha : Academia, 1985. 598 s. info
- Zangwill, Andrew. *Physics at surfaces*. 1st pub. Cambridge : Cambridge University Press, 1988. xiii, 454. ISBN 0-521-34752-1. info

GE081 Základy geochemie

Vyučující: [doc. RNDr. Josef Zeman CSc.](#)

Rozsah: 2/0. 3 kr. Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Přednáška je úvodem do jedné ze základních disciplin věd o Zemi. Význam geochemie roste zejména v poslední době, protože umožňuje kvantitativní posouzení procesů, které probíhají v jednotlivých geosférách a jejich vzájemné interakce. S rostoucím technologickým pokrokem se také prohlubuje vliv lidské činnosti na přirozené přírodní procesy. Kvantitativní přístup ke studiu těchto procesů v geochemii umožňuje odlišovat přirozené změny od změn vyvolaných člověkem. Pro studenty přináší přednáška základní informace o chemickém složení Země a jeho změnách.

Osnova:

- 1. Úvod, původ chemických prvků, kosmochemie, 2. Geochemie Sluneční soustavy a Země, 3. Nestabilní izotopy a jejich využití v geologii, 4. Stablní izotopy a jejich využití v geologii, 5. Vazby, struktury a povrchy, 6. Základní principy termodynamiky, 7. Dynamika procesů, 8. Fluidní obaly Země, 9. Zvětrávání, sedimentace a diagenese, 10. Geochemie metamorfních procesů, 11. Geochemie magmatických procesů, 12. Organická geochemie, 13. Distribuce prvků, užitá geochemie, 14. Geochemie životního prostředí

Výukové metody: 2/0. 3 kr. Ukončení: kz.

Metody hodnocení: Ve cvičeních jsou průběžně zadávány krátké kontrolní testy pro kontrolu zvládnutí základních pojmů a principů. Pro další pokračování ve cvičeních a získání zápočtu je nutná 70 % úspěšnost v testech. Zkouška následuje ve vypsáních termínech po získání zápočtu.

Literatura:

- *Geochemie [Bouška, 1980]*. Edited by Vladimír Bouška. Praha : Academia, 1980. 555 s. info
- Drever, James I. *The Geochemistry of Natural Waters*. : Prentice Hall, 1997. 450 s. ISBN 0-13-272790-0. info
- Drever, James I. *Geochimija prirodnych vod : The geochemistry of natural waters (orig.)*. Moskva : Mir, 1985. 439 s. info

JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška

Vyučující: [Mgr. Věra Hranáčová](#)

Rozsah: 0/0. 2 kr. Ukončení: zk.

Cíle předmětu: Zkouška prověřit, 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)