

MASARYKOVA UNIVERZITA  
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA



---

---

# ŽÁDOST O AKREDITACI

*Navazujícího magisterského studijního programu*

**C h e m i e**

*Obor*

**M a t e r i á l o v á c h e m i e**

---

---

**Brno, říjen 2011**

# OBSAH

OBSAH.....	1
A – Žádost o akreditaci / rozšíření nebo prodloužení doby platnosti akreditace bakalářského / magisterského stud. programu .....	3
Obor: Materiálová 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
C4010 Anorganická chemie III .....	25
C4015 Anorganická chemie III - seminář .....	26
C4120 Makromolekulární chemie.....	27
C5020 Chemická struktura.....	28
C5030 Chemická struktura - seminář.....	28
C5040 Jaderná chemie .....	29
C5060 Metody chemického výzkumu.....	31
C5300 Statistická termodynamika .....	32
C5320 Fyzikálně chemické základy NMR.....	33
C5340 Nerovnovážné systémy.....	34
C5380 Speciální laboratorní technika .....	34
C5440 Separční metody .....	35
C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie .....	36
C5870 EPR spektroskopie.....	37
C5880 Základy stereochemie.....	37
C5885 Základy stereochemie - seminář .....	38
C5920 Správná laboratorní praxe.....	39
C6010 Toxikologie .....	39
C6020 Jaderná chemie - laboratorní cvičení .....	41
C6170 Analýza materiálů - cvičení .....	41
C6250 Metody chemického výzkumu - praktikum .....	42
C6290 Atomová absorpční spektrometrie.....	43
C6300 Optická a hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem .....	43
C6310 Symetrie molekul.....	45
C6320 Chemická kinetika .....	45
C6330 Chemická kinetika - seminář .....	46
C6730 Fázové rovnováhy .....	46
C6750 Materiálová chemie kovů .....	47
C6790 Hmotnostní spektrometrie .....	48
C6800 Multinukleární NMR spektroskopie .....	49
C6815 Struktura a vlastnosti polymerů .....	50
C6830 Radioekologie.....	50
C6850 Chromatografické metody II .....	51
C6950 Chemická exkurze .....	52
C6960 Odborná praxe .....	52
C7000 Oborový seminář I.....	52
C7001 Diplomová práce I .....	53
C7031 Atomová spektrometrie .....	53
C7080 Lasery v analytické chemii .....	54
C7410 Struktura a reaktivita .....	55
C7670 Izotopové metody .....	56
C7680 Izotopové metody - laboratorní cvičení .....	56
C7700 Chemie nekovů .....	57
C7777 Zacházení s chemickými látkami.....	58
C7780 Inorganic Materials Chemistry .....	58

C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I .....	60
C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení.....	60
C8000 Oborový seminář II.....	61
C8001 Diplomová práce II.....	61
C8070 Molekulová spektroskopie.....	61
C8400 Kvantová chemie pevných látek, výpočty elektronové struktury .....	62
C8500 Mechanismy organických reakcí .....	63
C8510 Mechanismy organických reakcí - seminář .....	64
C8700 Technologie chemických výrob.....	65
C8780 Organic Photochemistry .....	66
C8800 Rtg strukturní analýza.....	66
C8810 Chemie přechodných prvků.....	67
C8840 Chemie makrocyclických sloučenin.....	67
C8845 Modelování chemických systémů v roztocích.....	68
C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II .....	69
C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení.....	69
C8870 Syntéza a analýza nových materiálů.....	70
C8880 Vybrané metody analýzy pevných látek .....	70
C8885 Supramolekulární chemie .....	71
C8950 NMR - Strukturní analýza .....	72
C9000 Oborový seminář III .....	73
C9001 Diplomová práce III .....	73
C9920 Úvod do kvantové chemie .....	73
C9930 Metody kvantové chemie .....	74
F5170 Úvod do fyziky plazmatu.....	75
F7460 Fyzika pevných látek pro nefyzikální obory .....	76
GE081 Základy geochemie .....	76
GE091 Mineralogie a geochemie.....	77
G7501 Fyzikální geochemie .....	78
G8601 RTG-prášková difraktoimetrie .....	78
JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška.....	79

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

## Obor: Materiálová chemie

<b>B – Charakteristika studijního programu a jeho oborů, pokud se na obory člení</b>			
Vysoká škola	Masarykova univerzita		
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta		
Název studijního programu	Chemie		
Název studijního oboru	Materiálová chemie		
Údaje o garantovi studijního oboru	<a href="#">doc. RNDr. Jiří Sopoušek CSc.</a>		
Zaměření na přípravu k výkonu regulovaného povolání	ne		
<b>Charakteristika studijního oboru (studijního programu)</b>			
<p>Materiálová chemie je významná součást materiálové vědy, která zaujímá centrální místo ve všech oborech výrobní činnosti. Studium vlastností materiálů a jejich využití je spojeno s lidskou činností od pradávna a objevování nových materiálů s lepšími vlastnostmi je motorem materiálního a technického pokroku. Od původních empirických metod zpracování přírodních materiálů lidstvo dospělo k dnešnímu stavu, kdy můžeme připravovat materiály s předem určenými vlastnostmi. Toho je dosaženo na základě detailního poznání vztahů mezi strukturou a fyzikálními a chemickými vlastnostmi daného materiálu. Ovlivněním struktury při zpracování je pak dosaženo požadovaných vlastností výrobku. Syntetická materiálová chemie úzce navazuje na příbuzné chemické disciplíny, jako je anorganická a organická chemie a v poslední době i biochemie. Studium materiálových vlastností je založeno na poznatcích matematiky, fyziky, fyzikální a analytické chemie. Výsledky výzkumu materiálové chemie jsou pak využity v různých výrobních oborech od elektrotechniky a strojírenství přes stavebnictví až po medicínu a ovlivňují rozvoj celé společnosti. Cílem studia je připravit absolventy, kteří mají dobré znalosti základních disciplín a získali dostatečný přehled ve specializovaných oblastech syntézy anorganických a polymerních materiálů, teoretických výpočtů a charakterizačních fyzikálně-chemických technik.</p>			
<b>Profil absolventa studijního oboru (studijního programu) &amp; cíle studia</b>			
<p>Znalosti absolventů jsou založeny na dobrých základech fundamentálních disciplín anorganické, organické, fyzikální a analytické chemie a fyziky pevné fáze. Studium těchto předmětů vede k pochopení struktury a chemických a fyzikálních vlastností anorganických a organických látek. Specializované předměty materiálové chemie budují znalosti o vztahu struktury materiálů a jejich vlastností. Důraz je kladen na širokou škálu metod přípravy, charakterizace a teoretického studia nových materiálů. Praktické zkušenosti s fyzikálně-chemickými metodami rentgenové difrakce, optické a elektronové mikroskopie, termické analýzy, hmotnostní spektrometrie, měřeními povrchu adsorpce dusíku, vibrační, atomové a NMR spektroskopie umožní rychlou adaptaci absolventů i na jiné metodiky, se kterými se ve své praxi střetnou. Hlubší specializace na materiály kovové, anorganické, polymerní a polovodičové je dosaženo vypracováním diplomové práce v některé z těchto oblastí. Absolventi oboru materiálové chemie jsou vybaveni teoretickými a praktickými znalostmi, které jim umožní pokračovat v dalším vzdělávání v oborech materiálových a chemických věd na univerzitách, technických univerzitách nebo ústavech Akademie věd. Stejně jsou připraveni uplatnit se v komerčních institucích ve výzkumu, vývoji, výrobě a kontrole. Absolventi tohoto studijního oboru naleznou uplatnění v široké oblasti profesí, které vyžadují odborné vzdělání na vysokoškolské úrovni orientované na vývoj, přípravu, zpracování a charakterizaci jak klasických materiálů kovových, keramických, skel, polymerních, polovodičových, tak všech nových progresivních materiálů, jako kompozitů, biomateriálů, hybridních a nanomateriálů. Vzhledem k širokému pojetí odbornosti jsou připraveni nejen na profesionální působení ve své specializaci, ale také na snadnou adaptaci k případnému působení v jiném příbuzném oboru technických nebo přírodních věd.</p>			
<b>Charakteristika změn od předchozí akreditace (v případě prodloužení platnosti akreditace)</b>			
<p>Drobné úpravy v nabídce povinně volitelných a doporučených předmětů. Po stránce vybavení instalace nové instrumentace pro charakteristiku nanočástic.</p>			
<b>Prostorové zabezpečení studijního programu</b>			
Budova ve vlastnictví VŠ	ano	Budova v nájmu – doba platnosti nájmu	-
<b>Informační zabezpečení studijního programu</b>			

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

<b>C – Pravidla pro vytváření studijních plánů SP (oboru) a návrh témat prací</b>					
<b>Vysoká škola</b>	Masarykova univerzita				
<b>Součást vysoké školy</b>	Přírodovědecká fakulta				
<b>Název studijního programu</b>	Chemie				
<b>Název studijního oboru</b>	Materiálová chemie				
<b>Název předmětu</b>	<b>rozsah</b>	<b>způsob zák.</b>	<b>druh před.</b>	<b>přednášející</b>	<b>dop. roč.</b>
Seznam předmětů je uveden v doporučeném studijním plánu, viz část C1.					
<b>Obsah a rozsah SZZk</b>					
<p>Státní závěrečná zkouška sestává z hlavního předmětu Materiálová chemie a dvou dalších předmětů ze skupiny Analytická chemie, Anorganická chemie, Fyzikální 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>					
<b>Okruhy otázek – povinný předmět:</b>					
<u>Materiálová chemie</u>					
<i>Struktura materiálů:</i>					
Chemická vazba. Základní typy vazeb v pevných látkách. Energie vazeb. Mřížková energie. Born-Haberův cyklus. Atomové a iontové poloměry.					
Prostorová mřížka, Bravaisovy mřížky, krystalová mřížka, reciproká mřížka. Základní strukturní typy kovů, iontových a kovalentních sloučenin. Primitivní, tělesně a plošně centrované kubické uspořádání. Hexagonální a kubické nejtěsnější uspořádání.					
Strukturní typy CsCl, NaCl, kubický a hexagonální diamant, ZnS-sfalerit a wurzite, NiAs, WC, CaF <sub>2</sub> , TiO <sub>2</sub> -rutil, SiO <sub>2</sub> , BiF <sub>3</sub> , ReO <sub>3</sub> , perovskit, spinel, korund, vrstevnaté struktury, CdCl <sub>2</sub> , grafit, h-BN. Silikáty. Allotropie a polymorfie.					
Poruchy ve struktuře. Defekty bodové, čárové, plošné, klastrové. Dislokace. Nestechiometrie. Hranice zrn. Amorfni materiály.					
Elektronická struktura pevných látek, Drudeho model elektronového plynu, elektrická a tepelná vodivost elektronového plynu, Sommerfeldův model, Fermiho koule, hustota stavů elektrony v periodickém potenciálu, pásová struktura, Fermiho plocha.					
Kmity krystalové mřížky, klasický popis harmonického krystalu, akustické a optické fonony, interakce fononů s elektromagnetickým polem, polaritony, elementy kvantového popisu, Debyeho model.					
Fázové a chemické rovnováhy. Fyzikální přeměny čistých látek. Jednoduché směsi. Rovnovážné fázové diagramy. Chemická rovnováha.					
<i>Vlastnosti materiálů:</i>					
Elektrické vlastnosti materiálů. Vodiče. Polovodiče, dopování, p-n přechod, bipolární tranzistor, unipolární tranzistor. Izolanty. Iontové vodiče, tuhé elektrolyty. Supravodiče. Termoelektrické materiály. Organické vodiče. Feroelektrika. Piezoelektrika.					
Mechanické vlastnosti materiálů. Tah, smyk, krut. Napětí a deformace. Elastická a plastická deformace. Hookův zákon. Pevnost. Tečení, lom, únava, tvrdost. Tvorba a šíření trhlin. Zpevňování. Vysoce tvrdé materiály.					
Tepelné vlastnosti materiálů. Teplota tání, tepelná vodivost, tepelná roztažnost. Materiály s negativním koeficientem tepelné roztažnosti.					

Optické vlastnosti materiálů. Index lomu, odrazivost, absorpce, propustnost. Lasery. Optická vlákna.

Magnetické vlastnosti materiálů. Feromagnetické, ferimagnetické, antiferomagnetické materiály. Molekulární magnety. GMR. CMR.

Principy, techniky a výsledné informace získané základními metodami fyzikálně chemické charakterizace materiálů: rentgenová prášková difrakce, neutronová difrakce, SAXS, termická analýza TG, DTA, DSC, NMR v pevné fázi, EPR, vibrační spektroskopie (infračervená a Ramanova), NIR, optická mikroskopie, SEM, TEM, EDAX, AFM, SPM, EXAFS, XANES, Augerova spektroskopie, LEED, SIMS, měření pevnosti a tvrdosti. Adsorpční metody. Metody pro měření velikosti částic a velikosti pórů.

#### *Příprava materiálů:*

Základní technologie výroby kovů, rafinace kovů, vliv nečistot na vlastnosti kovů, sorpční rafinační procesy, extrakční rafinační procesy, rozdělovací rovnováha.

Fe-C fázový diagram. Základní typy železných slitin. Litina. Ocel, strukturní složky ocelí. Třídy materiálů, legované oceli, ovlivňování struktury ocele – tepelné zpracování.

Základní typy neželezných slitin. Pájky, slitiny lehkých kovů, slitiny se střední teplotou tání, slitiny s vysokou teplotou tání.

Intermetalické sloučeniny. Speciální kovové materiály. Kompozity, porézní kovy, nanokrystalické kovové materiály, kovová skla, svařování kovů, slinuté kovy, prášková metalurgie.

Struktura a názvosloví polymerů. Přírodní a syntetické polymery. Molekulární hmotnost a distribuce makromolekul. Vztahy mezi strukturou polymerů a jejich vlastnostmi. Termodynamické podmínky vzniku makromolekul. Reakční kinetika a mechanismy přípravy. Chemické reakce polymerů. Reologie a zpracování polymerů. Degradace a stabilizace polymerů. Kompozitní materiály s polymerní maticí.

Příprava polymerů. Monomery. Iniciační reakce. Propagace. Radikálové polymerace. Aniontové polymerace. Kationtové polymerace. Koordinační polymerace. Kopropropagace a kopolymery. Terminační reakce a přenos. Kinetika polymerací. Řetězové reakce. Polykondenzace, násobná polyadice.

Reakce v pevné fázi. Difúze, Fickovy zákony. Nukleace homogenní a heterogenní. Rychlost chemických reakcí a parametry ovlivňující reakční rychlost. Kirkendallův poměr. Kinetika komplexních reakcí. Procesy na tuhých površích. Karbotermální redukce. Samoudržitelné reakce. Spalné reakce. Pyrolýza polymerů. Mechanochemická metoda. Reakce v mikrovlnném poli. Reakce za vysokých tlaků. Syntéza diamantů a tvrdých materiálů.

Přenos v plynné fázi. Pyrolýza aerosolů. Příprava fullerenu a uhlíkových nanotrubic.

Metoda prekurzorů, koprecipitace, citrátová metoda. Reakce v eutektických taveninách. Iontové kapaliny. Sonochemické reakce.

Sol-gelová metoda. Koloidní a alkoholátová metoda. Syntéza prekurzorů, hydrolýza, kondenzace, sušení, vypálení. Aerogely. Hybridní materiály.

Hydrotermální a solvotermální syntéza. Reaktory, mineralizátor, superkritický stav. Zeolity a zeolitické materiály. Hlinitokřemičitany, metalofosfáty. Syntéza, struktura, vlastnosti a použití. Primární a sekundární stavební jednotky. Sodalit, faujasit, Linde A, X, Y. Templátová syntéza. Löwensteinovo pravidlo. Katalytické vlastnosti zeolitů. Mezoporézní materiály, tenzidy, tvorba micel, lyotropní fáze. Supramolekulární templátování.

Vrstevnaté materiály, interkalace.

Příprava materiálů v požadovaném tvaru. Ingoty, kuličky, prášky, krystaly, tenké vrstvy a filmy, vlákna, trubice, whiskery, póry, kvantové body.

Metody přípravy monokrystalů. Czochralského, Stockbargerova a Bridgmanova metoda, zonální tavení, Verneuilova metoda, hydrotermální metoda, pěstování krystalů z roztoku, gelu, plynné fáze.

Chemická depozice z plynné fáze. Aparatury. Syntéza a vlastnosti prekurzorů. Depozice kovů, oxidů, nitridů,



polovodičů, supravodičů.

Příprava tenkých filmů. Chemická depozice, anodická oxidace, porézní alumina, napařování, nastříkávání, epitaxe. Monomolekulární samouspořádané vrstvy. Nanostrukturní materiály. Odlišnosti ve fyzikálních a chemických vlastnostech od makroskopických materiálů. Metody přípravy.

Biokompatibilní materiály.

Kombinatorická syntéza nových materiálů.

#### 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.

#### 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*

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

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

Konduktometrické metody: Přímá konduktometrie, konduktometrické titrace.

Elektrogravimetrie, coulometrie: 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 nízkospinové 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 chemie*, 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..

## Fyzikální chemie

### *I. Rovnováha*

#### *Termodynamika*

Ideální a reálné plyny. Kritický stav, princip korespondujících stavů. Tepelná rovnováha, teplota, tlak, nultá věta. První věta termodynamiky, vnitřní energie, teplo, práce. Stavové funkce. Standardní stavy. Termodynamická reverzibilita. Enthalpie, tepelné kapacity za konstantního tlaku a objemu. Termochemie. Hessův zákon. Kirchhoffova rovnice. Jouleův-Thomsonův jev. Kalorimetrie.

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

#### *Fázové rovnováhy*

Fázové přeměny čisté látky. Obecná podmínka fázové rovnováhy. Závislost chemického potenciálu čisté látky na teplotě a tlaku. Stabilita fází. Fázový diagram. Clapeyronova a Clausiova-Clapeyronova rovnice. Klasifikace fázových přechodů. Soustavy s reagujícími složkami. Trojsložkové fázové diagramy. Parciální molární veličiny. Gibbsova- Duhemova rovnice. Raoultův a Henryho zákon.

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

#### *Chemické rovnováhy*

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

#### *Základní pojmy statistické termodynamiky*

Konfigurace a její váha, Boltzmannovo rozdělení, molekulární partiční funkce a její vztah k vnitřní energii a entropii. Kanonický soubor, jeho partiční funkce. Užití statistické termodynamiky.

#### *Rovnovážná elektrochemie*

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

## *II. Pohyb*

### *Kinetická teorie ideálního plynu*

Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení rychlostí, rozdělení energií, mezimolekulární srážky, srážkový průměr, frekvence srážek, střední volná dráha. Tepelná vodivost, difúze, 1. a 2. Fickův zákon.

### *Základy nerovnovážné termodynamiky*

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

Nelineární nerovnovážná termodynamika. Oscilující reakce.

### *Transport iontů a kinetika přenosu elektronu*

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

### *Chemická dynamika*

Rychlost chemických reakcí Rychlostní zákon, rychlostní konstanta a 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 a fázové rozhraní*

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

#### *Koloidy a adsorpce*

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

### *III. Struktura*

#### *Základní pojmy kvantové mechaniky*

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

#### *Elektronová struktura atomů*

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

#### *Elektronová struktura molekul a metody jejího výpočtu*

Bornova-Oppenheimerova aproximace. Křivka potenciální energie dvojatomové molekuly. Překryvový integrál. Teorie valenční vazby - molekula vodíku. Typy vazeb v molekule, hybridizace atomových orbitalů.

Jednoelektronové přiblížení, teorie molekulových orbitalů (MO), MO jako lineární kombinace atomových orbitalů (LCAO), Slaterova a Gausova funkce. Vazebné, nevazebné a antivazebné orbitály, význam hraničních orbitalů, interakce orbitalů. Variační princip, poruchový počet, repulze elektronů, repulzní integrál, Hartreeova-Fockova teorie SCF. Roothanovy rovnice. p-elektronové přiblížení. Hückelova (HMO) a rozšířená Hückelova metoda (EHT). Mullikenova populační analýza. Zavedení spinu do vlnové funkce, spinorbitály, Slaterovy determinanty. Korelační energie, základy metody konfigurační interakce (CI).

#### *Struktura molekul*

Symetrie molekul. Metody studia struktury molekul. Molekulová mechanika.

#### *Elektrické, magnetické a optické vlastnosti molekul*

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

#### *Molekulová spektra*

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

#### *Magnetické rezonanční spektroskopie*

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

#### **Literatura:**

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

#### 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 chiraloty. 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 přesmyk.

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 (resonanční delokalizační energie). Benzoidní a nebenzoidní aromáty. Vlastnosti aromatických sloučenin, mechanismus elektrofilní aromatické substituce. Vliv substituce na jádře na vstup elektrofilu na subst. aromát. Empirická Hammettova rovnice, význam konstant  $\rho$  a  $\sigma$ .

Halogenderiváty a jejich strukturální 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, azoxysloučeniny 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.

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

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

Karboxylové kyseliny, jejich struktura a chemické vlastnosti. Vliv uhlíkatého zbytku a substituce na kyselost. Esterifikace. Funkční deriváty karboxylových kyselin (estery, halogenidy, anhydridy, amidy), jejich příprava a srovnání jejich vlastností a z toho vycházející využití v organické syntéze. Tuhy a jejich struktura, zmýdelnění. Substituční deriváty karboxylových kyselin (hydroxykyseliny-laktony, laktidy, aminokyseliny aktamy, halogenkyseliny, ketokyseliny). Deriváty kyseliny uhličitě, 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, pzrimidin (báze nukleových kyselin), pyridazin struktura. Puriny (základní představitelé, báze nukleových kyselin). Pteriny (struktura).

#### Literatura:

- Mc Murry J. *Organická chemie*, překlad 6. vydání, VUTium Brno a VŠCHT Praha, 2007.
- J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers: *Organic Chemistry*, Oxford University Press, New York 2001.
- E.L. Eliel, S.H. Wilen: *Stereochemistry of Organic Compounds*, John Wiley & Sons, Inc., New York 1994.
- E.L. Eliel: *A Practical Introduction to Stereochemistry*, John Wiley & Sons, Inc., New York 2001.
- G.T.W. Solomons: *Organic chemistry*, 6th ed. New York : John Wiley & Sons, Inc., 1996. P. Hrnčiar: *Organická chémia*, 3. vyd. Bratislava : SPN, 1990.
- O. Červinka: *Chemie organických sloučenin*. Díl 1. + 2., 1. vyd., Státní nakladatelství technické literatury, 1985 a 1987.
- M. Potáček, C. Mazal, S. Janků: *Řešené příklady z organické chemie*. 1. vyd. Brno, Masarykova univerzita v Brně, 2004.
- M. Potáček: *Organická chemie pro biologie*. 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 orbitaly 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 chemie*. 6. vyd. Bratislava : Slovenská technická univerzita v Bratislave, 1999.
- Toužín J. *Stručný přehled chemie prvků*, Skripta MU Brno, 2001
- Mc Murry J. *Organická chemie*, překlad 6. vydání, VUTium Brno a VŠCHT Praha, 2007.
- Sommer L. *Základy analytické chemie I*, VUTium Brno, 1998.
- Sommer L. a kol. *Základy analytické chemie II*, VUTium Brno, 2000.
- Vodrážka Z. *Biochemie*, 2. vyd., Praha : Academia, 2007.

#### Další povinnosti / odborná praxe

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

#### Návrh témat prací a obhájené práce

Témata diplomových prací vypisuje Rada Ústavu chemie na návrh učitelů a zveřejňuje jejich aktuální nabídku v dostatečném počtu. Student si z aktuální nabídky svobodně volí téma diplomové práce. O zadání diplomové práce na zvolené téma žádá student na začátku prvního semestru magisterského studia učitele, který téma navrhl. Zadáním diplomové práce se učitel, který téma vypsál, stává pro studenta, který si ho vybral, vedoucím diplomové práce. Rada Ústavu chemie písemně 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:

Nehydrolytická příprava hlinitokřemičitanů - [http://is.muni.cz/th/77687/prif\\_m/](http://is.muni.cz/th/77687/prif_m/)

Sonochemická příprava oxidických materiálů - [http://is.muni.cz/th/78121/prif\\_m/](http://is.muni.cz/th/78121/prif_m/)

Modifikace materiálů v různých formách výbojového plazmatu - [http://is.muni.cz/th/150650/prif\\_m/](http://is.muni.cz/th/150650/prif_m/)

Příprava a charakterizace fosfosilikátových materiálů - [http://is.muni.cz/th/211138/prif\\_m/](http://is.muni.cz/th/211138/prif_m/)

Příprava a charakterizace metalosilikátových materiálů - [http://is.muni.cz/th/211239/prif\\_m/](http://is.muni.cz/th/211239/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 Materiálová chemie a dvou dalších předmětů ze skupiny Analytická chemie, Anorganická chemie, Fyzikální 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
<b>Podzimní semestr</b>					
Povinné předměty					
<a href="#">C7000</a>	Oborový seminář I	2	0/2	z	<a href="#">Černík, Pinkas</a>
<a href="#">C7001</a>	Diplomová práce I	3	0/0/3	kz	vedoucí práce
<a href="#">C7777</a>	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	<a href="#">Příhoda</a>
<a href="#">C7780</a>	Inorganic Materials Chemistry	2+2	2/0	zk	<a href="#">Pinkas</a>
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	11			
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	10			
<b>Jarní semestr</b>					
Povinné předměty					
<a href="#">C6750</a>	Materiálová chemie kovů	2+2	2/0	zk	<a href="#">Brož, Vřešťál</a>
<a href="#">C6950</a>	Chemická exkurze	0	0/0	z	<a href="#">Janků</a>
<a href="#">C6960</a>	Odborná praxe	0	0/0	z	<a href="#">Šindelář</a>
<a href="#">C8000</a>	Oborový seminář II	2	0/2	z	<a href="#">Černík, Pinkas</a>
<a href="#">C8001</a>	Diplomová práce II	5	0/0/5	kz	vedoucí práce
<a href="#">C8870</a>	Syntéza a analýza nových materiálů	5+2	0/5	kz	<a href="#">Brož, Losos, Pinkas</a>
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	10			
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	2			

## 2. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
<b>Podzimní semestr</b>					
Povinné předměty					
<a href="#">C7777</a>	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	<a href="#">Příhoda</a>
<a href="#">C9000</a>	Oborový seminář III	2	0/2	z	<a href="#">Černík, Pinkas</a>
<a href="#">C9001</a>	Diplomová práce III	12	0/0/12	kz	vedoucí práce
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	16			
<b>Jarní semestr</b>					
Povinné předměty					
<a href="#">CA000</a>	Oborový seminář IV	2	0/2	z	<a href="#">Černík, Pinkas</a>
<a href="#">CA001</a>	Diplomová práce IV	20	0/0/20	kz	vedoucí práce
<a href="#">JA002</a>	Pokročilá odborná angličtina - zkouška	2	0/0	zk	<a href="#">Hranáčová</a>
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
<b>Podzimní semestr</b>					
Povinně volitelné předměty					
<a href="#">C4120</a>	Makromolekulární chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šindelář</a>
<a href="#">C5020</a>	Chemická struktura	2+2	2/0	zk	<a href="#">Brož</a>
<a href="#">C5030</a>	Chemická struktura - seminář	1	0/1	z	<a href="#">Brož</a>
<a href="#">C5300</a>	Statistická termodynamika	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šob, Vřešťál</a>
<a href="#">C5380</a>	Speciální laboratorní technika	1+2	1/0	zk	<a href="#">Černík</a>
<a href="#">C5880</a>	Základy stereochemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Černík, Toužín</a>
<a href="#">C5885</a>	Základy stereochemie - seminář	2	0/2	z	<a href="#">Černík, Toužín</a>
<a href="#">C7700</a>	Chemie nekovů	2+2	2/0	zk	<a href="#">Černík</a>
<a href="#">C8845</a>	Modelování chemických systémů v roztocích	2+2	2/0	zk	<a href="#">Lubal</a>
<a href="#">C9920</a>	Úvod do kvantové chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Munzarová</a>
<a href="#">F5170</a>	Úvod do fyziky plazmatu	3+2	2/1	zk	<a href="#">Zajíčková</a>
<a href="#">F7460</a>	Fyzika pevných látek pro nefyzikální obory	2+2	2/0	zk	<a href="#">Holý</a>
<a href="#">GE091</a>	Mineralogie a geochemie	3	2/0	kz	<a href="#">Losos</a>
<a href="#">G8601</a>	RTG-prášková difraktoetrie	3	2/0	kz	<a href="#">Vávra</a>
<b>Jarní semestr</b>					
Povinně volitelné předměty					
<a href="#">C4010</a>	Anorganická chemie III	2+2	2/0	zk	<a href="#">Černík, Příhoda</a>
<a href="#">C4015</a>	Anorganická chemie III - seminář	1	0/1	z	<a href="#">Černík, Příhoda</a>
<a href="#">C6170</a>	Analýza materiálů - cvičení	5	0/0/5	kz	<a href="#">Komárek</a>
<a href="#">C6320</a>	Chemická kinetika	2+2	2/0	zk	<a href="#">Sopoušek</a>
<a href="#">C6330</a>	Chemická kinetika - seminář	1	0/1	z	<a href="#">Sopoušek</a>
<a href="#">C6790</a>	Hmotnostní spektrometrie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Brož, Vřešťál</a>
<a href="#">C6815</a>	Struktura a vlastnosti polymerů	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šindelář</a>
<a href="#">C8400</a>	Kvantová chemie pevných látek, výpočty elektronové struktury	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šob</a>
<a href="#">C8700</a>	Technologie chemických výrob	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šindelář</a>
<a href="#">C8880</a>	Vybrané metody analýzy pevných látek	1+2	1/0	zk	<a href="#">Kanický, Otruba</a>
<a href="#">C8885</a>	Supramolekulární chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Mazal</a>
<a href="#">C9930</a>	Metody kvantové chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Munzarová</a>

### Doporučené volitelné předměty

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
<b>Podzimní semestr</b>					
Doporučené volitelné předměty					
<a href="#">C5040</a>	Jaderná chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Příhoda</a>
<a href="#">C5060</a>	Metody chemického výzkumu	2+2	2/0	zk	<a href="#">Táborský, Bittová, Preisler</a>
<a href="#">C5320</a>	Fyzikálně chemické základy NMR	3+2	2/1	zk	<a href="#">Sklenář, Fiala</a>
<a href="#">C5340</a>	Nerovnovážné systémy	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kučera</a>
<a href="#">C5440</a>	Separační metody	1+2	1/0	zk	<a href="#">Mazal</a>
<a href="#">C5860</a>	Aplikovaná NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Brož</a>
<a href="#">C5870</a>	EPR spektroskopie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kubáček</a>
<a href="#">C5920</a>	Správná laboratorní praxe	1+2	1/0	zk	<a href="#">Bláha, Klánová</a>
<a href="#">C6020</a>	Jaderná chemie - laboratorní cvičení	3+1	0/0/3	kz	<a href="#">Křivohlávek</a>
<a href="#">C7031</a>	Atomová spektrometrie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kanický, Otruba</a>
<a href="#">C7080</a>	Lasery v analytické chemii	2+2	2/0	zk	<a href="#">Novotný, Otruba</a>
<a href="#">C7410</a>	Struktura a reaktivita	2+2	2/0	zk	<a href="#">Klán</a>
<a href="#">C7670</a>	Izotopové metody	1+2	1/0	zk	<a href="#">Křivohlávek</a>
<a href="#">C7680</a>	Izotopové metody - laboratorní cvičení	3	0/2	kz	<a href="#">Křivohlávek</a>
<a href="#">C7700</a>	Chemie nekovů	2+2	2/0	zk	<a href="#">Černík</a>
<a href="#">C7790</a>	Počítačová chemie a molekulové modelování I	1+2	1/0	zk	<a href="#">Koča, Kulhánek</a>
<a href="#">C7800</a>	Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení	1	0/1	z	<a href="#">Koča, Kulhánek</a>
<a href="#">C8780</a>	Organic Photochemistry	2+2	2/0	zk	<a href="#">Klán</a>
<a href="#">C8840</a>	Chemie makrocyclických sloučenin	2+2	2/0	zk	<a href="#">Lubal</a>
<a href="#">G7501</a>	Fyzikální geochemie	5	2/1	zk	<a href="#">Zeman</a>
<a href="#">C6730</a>	Fázové rovnováhy	2+2	2/0	zk	<a href="#">Sopoušek</a>
<b>Jarní semestr</b>					
Doporučené volitelné předměty					
<a href="#">C4120</a>	Makromolekulární chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šindelář</a>
<a href="#">C5040</a>	Jaderná chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Příhoda</a>
<a href="#">C6010</a>	Toxikologie	1+2	1/0	zk	<a href="#">Picka</a>
<a href="#">C6020</a>	Jaderná chemie - laboratorní cvičení	3	0/0/3	kz	<a href="#">Křivohlávek</a>
<a href="#">C6250</a>	Metody chemického výzkumu - praktikum	5	0/0/5	kz	<a href="#">Farková, Vrbková</a>
<a href="#">C6290</a>	Atomová absorpční spektrometrie	1+2	1/0	zk	<a href="#">Komárek</a>
<a href="#">C6300</a>	Optická a hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem	1+2	1/0	zk	<a href="#">Kanický</a>
<a href="#">C6310</a>	Symetrie molekul	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kubáček</a>
<a href="#">C6800</a>	Multinukleární NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Pinkas</a>
<a href="#">C6830</a>	Radioekologie	1+2	1/0	zk	<a href="#">Křivohlávek</a>
<a href="#">C6850</a>	Chromatografické metody II	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šimek</a>
<a href="#">C7670</a>	Izotopové metody	1+2	1/0	zk	<a href="#">Křivohlávek</a>
<a href="#">C7680</a>	Izotopové metody - laboratorní cvičení	3	0/2	kz	<a href="#">Křivohlávek, Pavelka</a>
<a href="#">C8070</a>	Molekulová spektroskopie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Černík, Toužín</a>

<b>kód</b>	<b>název předmětu</b>	<b>kredit</b>	<b>rozsah</b>	<b>ukončení</b>	<b>vyučující</b>
<a href="#">C8500</a>	Mechanismy organických reakcí	2+2	2/0	zk	<a href="#">Klán</a>
<a href="#">C8510</a>	Mechanismy organických reakcí - seminář	1	0/1	z	<a href="#">Klán</a>
<a href="#">C8800</a>	Rtg strukturní analýza	2+2	2/0	zk	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">C8810</a>	Chemie přechodných prvků	2+2	2/0	zk	<a href="#">Novosad</a>
<a href="#">C8855</a>	Počítačová chemie a molekulové modelování II	2	1/0	k	<a href="#">Koča, Kříž</a>
<a href="#">C8856</a>	Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení	1	0/1	z	<a href="#">Koča, Kříž</a>
<a href="#">C8950</a>	NMR - Strukturní analýza	2+2	2/0	zk	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">GE081</a>	Základy geochemie	3	2/0	kz	<a href="#">Zeman</a>

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

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

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

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

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

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

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

[http://www.muni.cz/sci/313010/projects?from\\_record=1](http://www.muni.cz/sci/313010/projects?from_record=1)

[http://www.muni.cz/sci/313060/projects?from\\_record=1](http://www.muni.cz/sci/313060/projects?from_record=1)

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

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



**I – Uskutečňování akreditovaného stud. programu mimo sídlo vysoké školy**

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

## D – Charakteristika studijních předmětů

### CA000 Oborový seminář IV

**Vyučující:** [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [prof. RNDr. Jiří Pinkas Ph.D.](#)

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

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

**Osnova:**

- Příspěvky studentů, vyučujících a externistů.

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

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

**Literatura:**

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

### CA001 Diplomová práce IV

**Vyučující:** vedoucí práce

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

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

**Osnova:**

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

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

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

**Literatura:**

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

### C4010 Anorganická chemie III

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

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

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

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

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** Přednáška

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška

**Literatura:**

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

### C4015 Anorganická chemie III - seminář

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

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

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

**Osnova:**

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

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

**Metody hodnocení:** Ukončeno zápočtem.

**Literatura:**

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

## C4120 Makromolekulární chemie

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

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

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

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** Přednáška

**Metody hodnocení:** Písemná a ústní zkouška

**Literatura:**

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

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

## C5020 Chemická struktura

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Difrakce elektronů a rtg. záření . Elektrony jako částice i záření, kvantová čísla, difrakce na souboru rovin (Huygensova a Ewaldova konstrukce), přímá a reciproká mřížka, interference (Laueho a Braggova metoda), radiální distribuční funkce (Wierlova rovnice). 2. Absorpce elektronů a gama záření. Hmotnostní spektrometrie (metody ionizace, rozlišení a detekce, skupina molekulového píku, hlavní typy fragmentace). Moessbauerova spektroskopie (isotopový posun, kvadrupolové štěpení). 3. Fotoelektronová spektroskopie. Absorpce rtg. fotonu (XPS, ESCA), elektronu (Auger) a UV kvanta (UPS). Rtg. fluorescence. 4. Absorpce UV a vis. záření. Elektronová spektroskopie, (Franckův-Condonův princip, vibrační a rotační struktura energetických diagramů) termická relaxace, fluorescence, fosforescence (typy elektronových přechodů, částice v jednorozměrné potenciálové jámě, chromofory, auxochromy, posuny absorpcí vnějšími a vnitřními vlivy). Využití elektronové spektroskopie ve strukturní a kvantitativní analýze (Lambertův-Beerův zákon). 5. Molekuly v elektrickém poli (polarizovatelnost, indukovaný a permanentní dipolový moment, permitivita dielektrika). Polarizace indukovaná a orientační, Clausius-Mossottiho a Debyeova rovnice. Měření dipolových momentů (Halverstadt-Kumlerova metoda, Gugenheim-Smithova metoda). Index lomu a molární refrakce. 6. Molekuly v elektrickém poli světelné vlny. Rayleighův a Ramanův rozptyl, Ramanova spektroskopie (anisotropie polarizovatelnosti, depolarizace, Stokesovy a antistokesovy přechody, Ramanova spektra vibrační a rotační). 7. Absorpce IR a MW záření. IR spektra vibrační (harmonický a anharmonický oscilátor, energie vibračních hladin, typy normálních vibrací). Přechody mezi vibračními energetickými hladinami (NIR spektroskopie v kvalitativní a kvantitativní analýze). Spektra vibrační, rotační a rotační (tuhý a elastický rotor, rotační distorsní konstanta). 8. Přechod světla látkami. Lom světla (Snellův zákon, měření indexu lomu, závislost na vlnové délce, hustotě). Vliv elektrického pole (Kerrův efekt, Kerrův faktor a konstanta a jejich využití ve strukturní analýze). 9. Optická aktivita (specifická otáčivost, závislost na vlnové délce, Drudeova rovnice, Cottonův efekt, optická rotační disperse, cirkulární dichroismus). Optická otáčivost a struktura (absolutní hodnota, oktantové pravidlo). 10. Molekuly v magnetickém poli. (Magnetická indukce, magnetizace, anisotropie magnetické susceptibility. Dielektrika, paramagnetika, ferromagnetika (Curieův zákon, Weissova korekce, Curieova teplota). 11. Elektronová paramagnetická rezonanční spektroskopie. Elektron v magnetickém poli, podmínka resonance, Landého g-faktor, Hyperjemné štěpení - multiplicita signálů. 12. Nukleární magnetická rezonanční spektroskopie. Chování jader v magnetickém poli, jaderný spin, kvantová čísla, podmínka resonance, stínící konstanta (substituční, sterická a solvatační složka). Spin-spinová interakční konstanta, postupná redukce 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 využítí získaných informací ze spektroskopických metod (hmotnostní spektrometrie, difrakční analýza, IČ spektroskopie, NMR atd.) k identifikaci chemické struktury a budou schopni navrhnout vhodný postup ke studiu chemických látek a interpretovat získané údaje.

**Osnova:**

- 1. Difrakce elektronů a rtg. záření . Elektrony jako částice i záření, kvantová čísla, difrakce na souboru rovin (Huygensova a Ewaldova konstrukce), přímá a reciproká mřížka, interference (Laueho a Braggova metoda), radiální distribuční funkce (Wierlova rovnice). 2. Absorpce elektronů a gama záření. Hmotnostní spektrometrie (metody ionizace, rozlišení a detekce, skupina molekulového píku, hlavní typy fragmentace). Moessbauerova spektroskopie (isotopový posun, kvadrupolové štěpení). 3. Fotoelektronová spektroskopie. Absorpce rtg. fotonu (XPS, ESCA), elektronu (Auger) a UV kvanta (UPS). Rtg. fluorescence. 4. Absorpce UV a vis. záření. Elektronová spektroskopie, (Franckův-Condonův princip, vibrační a rotační struktura energetických diagramů) termická relaxace, fluorescence, fosforescence (typy elektronových přechodů, částice v jednorozměrné potenciálové jámě, chromofory, auxochromy, posuny absorpcí vnějšími a vnitřními vlivy). Využití elektronové spektroskopie ve strukturální 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 strukturální analýze). 9. Optická aktivita (specifická otáčivost, závislost na vlnové délce, Drudeova rovnice, Cottonův efekt, optická rotační disperse, cirkulární dichroismus). Optická otáčivost a struktura (absolutní hodnota, oktantové pravidlo). 10. Molekuly v magnetickém poli. (Magnetická indukce, magnetizace, anisotropie magnetické susceptibility. Dielektrika, paramagnetika, ferromagnetika (Curieův zákon, Weissova korekce, Curieova teplota). 11. Elektronová paramagnetická rezonanční spektroskopie. Elektron v magnetickém poli, podmínka resonance, Landého g-faktor, Hyperjemné štěpení - multiplicita signálů. 12. Nukleární magnetická rezonanční spektroskopie. Chování jader v magnetickém poli, jaderný spin, kvantová čísla, podmínka resonance, stínící konstanta (substituční, sterická a solvatační složka). Spin-spinová interakční konstanta, postupná redukce multipletů, počet NMR signál a symetrie molekuly, intenzita signál a využití v kvantitativní analýze.

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

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

**Literatura:**

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

## C5040 Jaderná chemie

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

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (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  $\beta^+$ ,  $\beta^-$ , 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  $\alpha$ : výskyt, přeměnová energie, spektrum emitovaných částic, výklad pomocí tunelového efektu. Procesy spojené s deexcitací jádra: emise fotonů (přechody elektrické a magnetické, výběrové pravidlo, okamžitá a zpožděná emise, jaderné izomery), vnitřní konverze, emise nukleonů. Samovolné štěpení: tunelový efekt, souvislost s kapkovým modelem jádra, aktivační energie, parametr štěpení. Větvené přeměny. Odrazová energie (odvození) a chemické následky radioaktivních přeměn, vliv změny atomového čísla. 4. Kinetika radioaktivních přeměn Základní zákon radioaktivních přeměn, přeměnová konstanta, rychlost přeměny, aktivita, měrná aktivita, jednotky. Časová změna aktivity, poločas přeměny, jeho určování z časové změny aktivity, poločas u větvené přeměny. Statistický charakter radioaktivní přeměny. Hmotnost radioaktivního nuklidu, určování velmi dlouhých poločasů. Chemické chování stopových koncentrací radioaktivních nuklidů. Určování krátkých dob života excitovaných hladin. Kinetika hromadění radioaktivního produktu radioaktivní přeměny (odvození). Trvalá radioaktivní rovnováha, přehled radioaktivních řad, riziko radonu. Přechodná radioaktivní rovnováha. Generátor krátkodobého radioaktivního nuklidu. Přirozená radioaktivita a radioaktivní prvky. 5. Ionizující záření Základní pojmy: ionizace, excitace, absorpce a dosah záření, sdělování energie, změny energie a toku záření při průchodu látkou. Dávka záření, dávkový příkon, expozice, expoziční příkon, lineární přenos energie. Mechanismus absorpce záření alfa (jaderné brzdění, interakce s orbitálními elektrony, Braggova křivka), beta (interakce s orbitálními elektrony, brzděná 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  $\gamma$  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.

**Výukové metody:** přednáška

**Metody hodnocení:** Zkouška ústní.

**Literatura:**

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

## C5060 Metody chemického výzkumu

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Elektronová mikroskopie. Interakce elektronů s pevnou látkou, vlnové vlastnosti elektronu. Elektronový mikroskop (elektromagnetické čočky, elektronová tryska, vakuová soustava), tvorba obrazu a vznik kontrastu. Difrakce na monokrystalu a na polykrystalu. Příprava vzorků - leptání.
- 2. Difrakce rentgenova záření. Elementární krystalografie: symetrie struktury, prostorové grupy symetrie, difrakce rtg. záření, strukturní faktor. Základy strukturní analýzy: sběr dat, jejich redukce, fázový problém a jeho řešení, zpřesnění strukturního modelu, interpretace struktury.
- 3. Krystalografie proteinů. Makromolekulární krystalizační techniky, metoda sedící a visící kapky, očkování. Difrakční experiment: zdroje rtg. záření, detektory, kryokrystalografie. Metody řešení fázového problému u proteinů, metoda molekulárního přemístění, metody kovových derivátů (SIR, MIR, MIRAS), MAD a selenoproteiny. Mapy elektronové hustoty, Výstavba strukturního modelu a jeho zpřesňování.
- 4. Fluorescenční spektroskopie. Fluorescence a další luminiscenční spektroskopie, doba života, kvantový výtěžek. Intenzita fluorescence, zhášení a samozhášení. Spektra excitační a emisní. Kvazičarová fluorescence a fluorescence v pevné fázi. Spektrometr a postup měření.
- 5. Techniky Ramanovy spektroskopie. Pružný a nepružný rozptyl záření (stokesova, antistokesova oblast a Rayleighova linie); výběrová pravidla – polarizovatelnost a tranzitní integrál, depolarizační faktory Ramanových čar; elektronická, rezonanční a povrchově zesílená Ramanova spektroskopie; nelineární efekty - stimulovaný RA efekt, inverzní RA efekt, hyper-RA efekt, koherentní antistokesova Ramanova spektroskopie; experimentální technika měření Ramanových spekter.
- 6. IR spektroskopické metody. Vznik pásů v IR spektrech, výběrová pravidla – dipólový moment a tranzitní integrál; normální, vyšší harmonické a kombinační vibrační přechody; experimentální technika měření IR spekter, používané materiály a rozpouštědla, příprava vzorků k měření; aplikace v kvalitativní, strukturní a kvantitativní analýze, studium vazebných poměrů (řády a pevnost vazeb).



- 7. Blízkoinfračervená spektroskopie. NIR spektroskopie jako metoda bez úpravy vzorku, nízká citlivost, nízké rozlišení. Matematické metody pro kvantitativní a kvalitativní analýzu. Provozní analytika - přenos signálu skleněnými vlákny, kontrola stejnosti produktu při automatické výrobě.
- 8. 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. Elektrodotový systém, elektrodotová 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

## C5300 Statistická termodynamika

**Vyučující:** [prof. RNDr. Mojmír 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. Distri-buční 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. Fluktuace částic a termodynamických veličin. Statistika výskytu fluktuací. Fluktuace energie 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

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

**Výukové metody:** Přednášky a cvičení

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška

**Literatura:**

- *Understanding NMR spectroscopy*. Edited by James Keeler. Chichester : Wiley, 2005. xv, 459 p. ISBN 9780470017876. info
- *Protein NMR spectroscopy principles and practice*. San Diego : Academic Press, 1996. 587 s. ISBN 0-12-164490-1. info
- *NMR and the periodic table*. Edited by Robin Kingsley Harris - Brian E. Mann. London : Academic Press, 1978. 459 s. ISBN 0-12-327650-0. info
- Cavanagh, John - Fairbrother, Wayne J. *Protein NMR Spectroscopy. Principles and Practice*. San Diego : Academic Press, 1996. 587 s. ISBN 0-12-164490-1. info
- *Two-dimensional NMR spectroscopy : applications for chemists and biochemists*. Edited by William R. Croasmun - Robert M. K. Carlson. 2nd ed. New York : VCH Publishers, 1994. xxii, 958. ISBN 1-56081-664-3. info
- Sanders, Jeremy K. M. *Modern NMR spectroscopy : a workbook of chemical problems*. 2nd ed. Oxford : Oxford University Press, 1993. 127 s. ISBN 0-19-855812-0. info
- Evans, Jeremy N. S. *Biomolecular NMR spectroscopy*. Oxford : Oxford University Press, 1995. xvi, 444 s. ISBN 0-19-854766-8. info
- Hoch, Jeffrey C. - Stern, Alan S. *NMR data processing*. New York : Wiley-Liss, 1996. xi, 196 s. ISBN 0-471-03900-4. info

- Hore, Peter J. - Jones, Jonathan A. - Wimperis, Stephen. *NMR :the toolkit*. 1st pub. Oxford : Oxford University Press, 2000. 85 s. ISBN 0-19-850415-2. info
- Rahman, Atta-ur-. *One and Two Dimensional NMR Spectroscopy*. 1. vyd. Amsterdam : Elsevier Science Publishers B.V., 1989. 578 s. ISBN 0-444-87316-3. info
- Ven, Frank J. M. van de. *Multidimensional NMR in Liquids :basic principles and experimental methods*. New York : VCH Publishers, 1995. 399 s. ISBN 1-56081-665-1. info

### C5340 Nerovnovážné systémy

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

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf 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 kriteria 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

### C5380 Speciální laboratorní technika

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Manipulace sloučenin citlivých vůči vlhkosti a kyslíku. Inertní plyny a jejich čištění. Detekce vody a kyslíku v inertních plynech. 2. Rukavicový box s inertní atmosférou. Konstrukce jednoduchého suchého boxu. Dosažení a udržování inertní atmosféry v boxu. Práce v rukavicovém suchém boxu. Polyethylenový rukavicový pytel. 3. Základní komponenty laboratorního skla pro práci v inertní atmosféře. Skleněné zábrusy a broušené kohouty. Vakuové tuky a jejich fyzikální a chemické vlastnosti. Nemazané spoje a sklo-teflonové ventily. Elastoméry pro výrobu o-kroužků a jejich chemická odolnost. 4. Vakuum v chemické laboratoři. Rotační olejové vývěvy a diafragmové vývěvy.

Difuzní vývěva a její zapojení do vakuového systému. Teorie čerpání a vytváření vakua. Vakuometry. Detekce a lokalizace netěsností vakuových aparatur. 5. Techniky práce v inertní atmosféře. Rozvod vakua a inertních plynů. Principy techniky Schlenkových nádobek. Laboratorní sklo Schlenkova typu. Technika injekční stříkačky a kanyly. 6. Aparatury konstruované z laboratorního skla Schlenkova typu. Základní operace v ochranné inertní atmosféře: odměřování látek, transfer-rozpouštědel, magnetické a mechanické míchání, filtrace, destilace, sublimace, Soxhletova extrakce. 7. Základní schema a funkce vakuové linky. Čerpací stanice a hlavní rozvod vakua. Pracovní stanice. Přístroje pro měření tlaku plynů. 8. Operace na vakuové lince. Manipulace kondenzovatelných plynů a těkavých kapalin. Transfer a kvantitativní měření množství nekondenzovatelných plynů. Separace těkavých sloučenin. Stanovení tenze par, teploty tání a molekulové hmotnosti. 9. Manipulace korozivních fluoridů a jiných vysoce reaktivních sloučenin. Chemická odolnost konstrukčních materiálů. Kovové a plastové ventily a fitinky. Vakuové systémy pro manipulaci těkavých fluoridů. Příprava vzorků korozivních sloučenin pro měření IR, Ramanových a NMR spekter. 10. Rozpouštědla a reagenty. Čištění a sušení rozpouštědel. Bezpečné zacházení s plyny v tlakových lahvích. Příprava a čištění reakčních plynů. Zkapalněné plyny jako rozpouštědla. 11. Spektroskopie matricově izolovaných látek - technika pro studium reaktivních sloučenin. Materiály matric a jejich vlastnosti. Příprava matric s nestabilními částicemi. Spektra specií izolovaných v matrici. 12. Základy preparativní kryochemie. Klasifikace plynných částic vhodných pro kryochemické experimenty. Konstrukce kryochemických reaktorů. Kryochemické syntézy s parami kovů. Kryochemie molekul generovaných při vysokých teplotách. 13. Speciální zařízení a operace v anorganické syntéze. Reakce za vysokých tlaků. Sonochemie. Syntézy v elektrických výbojích. Fotochemické reakce s UV zářením. Selektivní stimulace chemických reakcí zářením infračerveného laseru.

**Výukové metody:** Výuka formou přednášky

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška

**Literatura:**

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

## C5440 Separáčnı metody

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Chromatografické metody. Úvod, základnı teorie a pojmy. Klasifikace chromatografických systémů a postupů. Základnı teoretické modely popisující chromatografii. Retenční rovnice, teoretické patro, faktory ovlivňující separáčnı účinnost, elučnı poměr a rozlisenı.
- 2. Plynová chromatografie. Základnı pojmy. Van Deemterova rovnice. Technika GC. Blokové schema plynového chromatografu. Nosný plyn, techniky dávkování vzorku, náplňové a kapilární chromatografické kolony, stacionární fáze, enantioselektivnı kolony.
- 3. Plynová chromatografie. Hlavnı metody detekce použiváné v GC. Plamenově ionizační detektor (FID), tepelně vodivostnı detekce (TCD), elektronový záchyt (ECD), spojení GC s hmotnostnı spektrometrem (GC-MS).
- 4. Plynová chromatografie. Kvalitativnı analýza, identifikace z elučnıch údajů, elučnı závislosti (Kovatsovy indexy), selektivnı detektory. Kvantitavnı analýza, faktory ovlivňující přesnost kvantitativnı analýzy, metody kalibrace.

- 5. Kapalinová chromatografie. Základní pojmy. Chromatografie na sloupci, flash chromatografie - základy techniky, příprava kolon, detekce, stacionární fáze. Planární chromatografie. Papírová 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 ionxů a jejich vlastnosti - selektivita ionxů. 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. *Separace metody v organické chemii a*. 1. vyd. Bratislava : Univerzita Komenského, 1985. 240 s. info
- Churáček, Jaroslav. *Analytická separace látek*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1990. 384 s. ISBN 80-03-00569-8. info
- Poole, Colin F. - Poole, Salwa K. *Chromatography today*. Amsterdam : Elsevier, 1991. 1026 s. ISBN 0-444-89161-7. info
- Kolektiv., *Moderní separační metody*, ČSAV Praha 1988.

## 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 <sup>1</sup>H 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 dipirydyly-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 kvapalin*. 1. vyd. Bratislava : VEDA vydavateľstvo 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, McConnelllova 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 ne vazebných interakcí, stereochemicky nerigidní a fluxní molekuly, struktura molekul ve volném a krystalickém stavu. Stereochemie složitých sloučenin: geometrie molekul koordinačních sloučenin, struktura anorganických polymerů, geometrie polyedrických molekul, struktura boranů, klastery.

**Výukové metody:** Přednáška

**Metody hodnocení:** ústní zkouška

**Literatura:**

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

### **C5885 Základy stereochemie - seminář**

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

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

## C5920 Správná laboratorní praxe

**Vyučující:** [doc. RNDr. Luděk Bláha Ph.D.](#), [doc. RNDr. Jana Klánová Ph.D.](#)

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

**Cíle předmětu:** Na konci kurzu budou studenti schopni: ; - porozumět principům GLP a nutnosti jejich dodržování pro zajištění kvality analytických výsledků.; - pracovat s příslušnými normami.; - diskutovat organizace laboratoře a podmínky práce, akreditace zkušebních laboratoří a zkoušení jejich způsobilosti. ; - objasnit validaci zařízení, analytického systému a analytických metod ; - vysvětlit provozní charakteristiky metod a hodnocením výsledků analýz. ; - realizovat správně odběry vzorků včetně základních technik odběru z homogenních a nehomogenních objektů; - navrhovat a vyhodnocovat vzorkovací plán s důrazem na vzorkování složek životního prostředí.; - chápat a vysvětlit potřebu GLP v praxi (testování bezpečnosti látek pro člověka a prostředí, mikrobiologie, laboratorní zvířata, léčiva, GMO atd.).

**Osnova:**

- I. Principy a cíle GLP. Vývoj, legislativa, zabezpečování a řízení jakosti. II. Základní opatření. Organizace laboratoře a podmínky činnosti. III. Akreditace zkušebních laboratoří. Norma ČSN EN ISO/IEC 17025, terminologie. IV. Zkoušení způsobilosti laboratoří. Metodika. V. Validace a testování. Validace zařízení, metody, analytického systému a dat. VI. Validace analytických metod. VII. Stanovení provozních charakteristik analytické metody. Dokumentace analytické metody. VIII. Hodnocení výsledků ve vztahu k limitním hodnotám. Regulační diagramy. IX. Zásady správného odběru vzorků. Homogenní a heterogenní objekty - randomizované a segregované. Chyby vzorkování a vzorkovací plán. X. Základní techniky odběru vzorků. Test homogeneity. Odběr z nehomogenních objektů. Zajištění náhodnosti odběru vzorků. Systematické vzorkování nehomogenních materiálů. XI. Návrh a vyhodnocení vzorkovacího plánu. Vyhodnocení shodnosti a správnosti vzorkování. Dokumentace vzorkování. XII. Vzorkování pro analýzu složek životního prostředí.

**Výukové metody:** přednášky (týdenní cyklus)

**Metody hodnocení:** písemný test, kolokvium

**Literatura:**

- Crosby, N. T. - Prichard, F. E. *Quality in the Analytical Laboratory*. Chichester : J. Wiley, 1995. Analytical Chemistry by Open Learning (Series). ISBN 0 471 95470 5. info
- Mestek, O. - Nondek, L. *Zásady správného odběru vzorků pro analýzu životního prostředí*. Praha : Eurachem - ČR, 1995. Kvalimetrie, 4. ISBN 80-901868-0-7. info

## C6010 Toxikologie

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

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

**Cíle předmětu:** Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět a vysvětlit: základní pojmy v toxikologii a chemické bezpečnosti; místní účinky, akutní a chronické systémové účinky, pozdní účinky,



nebezpečné fyzikálně chemické vlastnosti a ekotoxikologické vlastnosti látek a přípravků; metody testování a zásady hodnocení vlastností, klasifikace a označování nebezpečných látek a přípravků; faktory ovlivňující účinky látek na lidský organizmus; interakce látek s organizmem – expozice, vstřebávání, distribuce, biotransformace a eliminace xenobiotik, interakce na molekulární, buněčné a orgánové úrovni; právní předpisy České republiky a EU v oblasti látek a přípravků, ochrany veřejného zdraví a bezpečnosti a ochrany zdraví při práci; přípustné limity škodlivin v pracovním ovzduší a v pitné vodě, maximální limity reziduí pesticidů v potravinách; zásady hodnocení rizik a ochrany zdraví při práci s látkami a přípravky, postupy při nehodách spojených s expozicí látkám a přípravkům; nebezpečné vlastnosti významných anorganických a organických látek; zdroje informací o nebezpečných vlastnostech látek a přípravků.

#### **Osnova:**

- 1. Úvod, cíle a náplň předmětu.
- Základní pojmy - toxikologie, chemická bezpečnost, chemické škodliviny, xenobiotika, expozice, dávka, účinek, doba latence, odpověď, nebezpečnost, riziko, klasifikace, nebezpečné látky a přípravky, výstražné symboly nebezpečnosti, R- a S-věty.
- Místní účinky látek, testování a hodnocení akutních dráždivých a žíravých účinků látek, látky a přípravky dráždivé a žíravé.
- 2. Celkové (systémové) účinky látek, akutní a chronické otravy, testování akutní, subakutní, subchronické a chronické toxicity, LD50, LC50, NOAEL, LOAEL, hodnocení toxicity, látky a přípravky vysoce toxické, toxické a zdraví škodlivé.
- Senzibilizace, alergie, testování a hodnocení senzibilizujících účinků látek, látky a přípravky senzibilizující.
- 3. Pozdní účinky látek.
- Mutageny, genové, chromozomové a genomové mutace, genetická toxikologie, testy reverzních mutací, chromozomových aberací, poškození a reparace DNA, epidemiologické studie, hodnocení mutagenity, látky a přípravky mutagenní kategorie 1, 2 nebo 3.
- 4. Karcinogenita, mechanismus karcinogeneze, testování karcinogenity, epidemiologické studie, hodnocení karcinogenity, látky a přípravky karcinogenní kategorie 1, 2, nebo 3.
- 5. Reprodukční a vývojová toxicita, embryotoxicita, teratogenita, testování reprodukční toxicity a teratogenity, epidemiologické studie, hodnocení reprodukční toxicity, látky a přípravky toxické pro reprodukci kategorie 1, 2, nebo 3.
- 6. Nebezpečné fyzikálně chemické vlastnosti, testování, látky a přípravky výbušné, oxidující, extrémně hořlavé, vysoce hořlavé a hořlavé.
- 7. Vlastnosti látek nebezpečné pro životní prostředí, ekotoxikologie, testování toxicity a dalších vlastností, hodnocení ekotoxicity a dalších vlastností nebezpečných pro životní prostředí, látky a přípravky nebezpečné pro životní prostředí.
- 8. Faktory ovlivňující účinek látky - látka, organizmus, dávka, další.
- 9. Interakce látek s organizmem. 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 Pícka - 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 - Klusůň, 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 SiO<sub>2</sub>.
- 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 Dubského. 4. Mikrostanovení síry dle Schönigera. 5. Stanovení dusíku Kjehldalovou metodou. 6. Stanovení dusíku Kjehldalovou metodou s využitím automatického titrátoru a přístroje EcaFlow. 7. Stanovení barviv metodou TLC. 8. Coulometrické stanovení mědi ve víně pomocí automatického laboratorního analyzátoru EcaFlow. 9. HPLC - Analýza směsi methylxantinů. 10. ITP - Stanovení kyseliny glutamové. 11. ITP stanovení aminopolykarboxylových kyselin. 12. Plynová rozdělovací chromatografie - Určení složení rozpouštědel. 13. Stanovení mědi ve víně metodou AAS. 14. UV spektrofotometrie - Stanovení bílkoviny ve vejci. 15. Stanovení obsahu iontů kadmennatého, zinečnatého a olovnatého voltametriky 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 přídatku. 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); elektroabraze (ablace) elektrickou jiskrou, obloukem; laserová ablace. 9. Zavádění plynných 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. Elektrodová 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. Elektroková 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 elektrokové reakce, elektrokový 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, Eudovít. *Chemická kinetika*. 2. přeprac. vyd. Bratislava : Slovenské pedagogické nakladatelství, 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

### 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 predikcí 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. Gígsova 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 chlazení, DTA, DSC, ...). Zdroje dat a jejich přesnost. 7. Reálné fázové rovnováhy: jednosložkové soustavy, binární soustavy (koexistence kapalné, plynné a tuhé 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 výpotů fázových rovnováh a fázových diagramů v reálných soustavách. Souvislosti mezi fázovými, fyzikálními a mechanickými vlastnostmi. 9. Fázové transformace. Stabilní a metastabilní 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

## **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 - sorpční rafinační procesy - 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 nástřiky 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
- Pišek, František. *Nauka o materiálu I*. 1. vyd. Praha : Nakladatelství Československé akademie věd, 1957. 754 s. info
- Pišek, František. *Nauka o materiálu. II. Sv. 1*. 1. vyd. Praha : Nakladatelství Československé akademie věd, 1959. 658 s. info
- Pišek, 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

## C6790 Hmotnostní spektrometrie

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

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

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

**Osnova:**

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

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

**Metody hodnocení:** Výuka probíhá týdně, ukončení je ústní zkouškou. Součástí výuky jsou 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. (příř 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 multipletů. 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

### 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:** [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [prof. RNDr. Jiří Pinkas Ph.D.](#)

**Rozsah:** 0/2/0. 2 kr. Ukončení: z.

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

## Osnova:

- Příspěvky studentů, vyučujících a externistů.

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

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

## Literatura:

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

## C7001 Diplomová práce I

**Vyučující:** vedoucí práce

**Rozsah:** 0/0/3. 3 kr. Ukončení: kz.

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

## Osnova:

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

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

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

## Literatura:

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

## C7031 Atomová spektrometrie

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

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

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

## Osnova:

- 1. Elektromagnetické záření, elektromagnetická vlna, rychlost ve vakuu, Poyntigův vektor, Planckův vyzařovací zákon, foton. Interakce záření s hmotou. Einsteinovy zákony pro absorpci a 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, fotovoltaiické 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 Saha 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

## C7080 Lasery v analytické chemii

**Vyučující:** [Mgr. Karel Novotný Ph.D.](#), [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:** Principy laserů a jejich aplikace v chemické analýze materiálů, životního prostředí a řízení a kontrole technologických procesů, základním a kosmickém výzkumu.

**Osnova:**

- 1. Principy laserové techniky: Einsteinovy zákony pro emisi a absorpci záření, pojem koherence záření, inverzní populace, metastabilní stavy atomů a molekul, aktivní prostředí.
- 2. Zesilovač a generátor záření. Optická zpětná vazba, rezonátory, módy, kvalita Q, pojem Q-modulace. Modulace aktivní a pasivní, synchronizace módů, femtosekundové oscilátory.
- 3. Aktivní prostředí laserů: Plynové lasery (He-Ne.), energetické diagramy; molekulové CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, HCN lasery; lasery v pevné fázi (rubínový a Nd-YAG), optické čerpání, pulsní a kontinuální provoz; iontové lasery (Ar); excimerové lasery (KrF); polovodičové lasery (GaAs, CdHgSeTe); chemické lasery (HF).
- 4. Plynule laditelné lasery barvivové (Rhodamin), pevnolátkové (Safir:Ti), frekvenční a spektrální vlastnosti, konstrukce jednomódových laditelných laserů. Pulsní lasery, koherence a frekvenční spektrum záření krátkých impulsů.
- 5. Výkonové parametry laserů: Kontinuální, šum a stabilita; Pulzní výkon, délka pulsů, stabilita.
- 6. Laserové záření a optické vlastnosti materiálů, průchod elmag. záření hmotným prostředím, nelineární optika; absorpce záření v povrchových vrstvách pevných materiálů.

- 7. Analytické aplikace s využitím vysoké koncentrace energie v paprsku: Laserová ablace pro povrchovou a lokální analýzu materiálů v kombinaci s dalšími spektrálními metodikami (AAS, ICP, OES); laserová jiskra v emisní spektrometrii, MALDI.
- 8. Laserová spektrometrie nenasyčených stavů: atomová fluorescence fotoionizace (jedno- a dvoufotonová) a její analytické aplikace (LEI), Ramanova spektrometrie, absorpční spektrometrie UV-VIS-IR s vysokým rozlišením, optoakustická spektrometrie, absorpční spektrometrie nízkých absorbancí.
- 9. Laserová spektrometrie nasycených stavů (saturační spektrometrie) bezdopplerovská absorpční spektrometrie jedno- a dvoufotonová, frekvenční standardy, absorpční spektrometrie vysokých absorbancí, heterodynní spektrometrie.
- 10. Detekce jednotlivých atomů a molekul, prostorová orientace molekul v pevné fázi, prostorová strukturní analýza v nanotechnologiích a biologii.
- 11. Analýza vzdálených objektů pomocí LIDARu: analýza plyných emisí, smogu, bojových plynů. Analýza nebezpečných vzorků na dálku: spektrální analýza radioaktivního odpadu, vzorků za vysokých teplot (pece, reaktory), nedostupných (stožary, vrty).
- 12. Dálkový průzkum Země a zemské atmosféry (heterodynní nelineární spektrometrie, analýza gravitačního pole).

**Výukové metody:** teoretická příprava

**Metody hodnocení:** přednáška, ústní zkouška

**Literatura:**

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

## 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 elektrofilý (teorie HSAB). Rychlostní konstanty a teorie tranzitního stavu. Aktivace a hnací síla chemických reakcí. Aktivační entalpie a entropie. Kinetika cyklizačních reakcí. Hammondův postulát. Bellův–Evansův–Polanyiho princip. O'Ferralloy-Jencksovy diagramy. Curtinův-Hammettův princip. 8. Termodynamika a kinetika jako prostředky ke studiu mechanismů chemických reakcí. Vztah pro Gibbsovu energii (LFER): Hammettova rovnice. Taftova rovnice. QSAR. Kinetické izotopové efekty. 9. Katalýza. Specifická a obecná acidobazická katalýza. Brønstedova korelace. Termodynamický cyklus. Heterogenní katalýza. Katalýza s přenosem mezi fázemi. 10. Přenos elektronu. Ionizační potenciál, elektronová afinita a charge-transfer (CT) komplexy. Marcusova teorie. Reakce ve vnitřní a vnější sféře. Přenos elektronu v SN2 a SRN1



reakcích. 11. Fotochemie. Excitace elektromagnetickým zářením. 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: Hraníční 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](#), [doc. RNDr. Stanislav Pavelka CSc.](#)

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

### **C7780 Inorganic Materials Chemistry**

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

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

**Cíle předmětu:** This course covers the basic principles of Materials Chemistry with the emphasis on inorganic materials. The lecture focuses on the relation between structure and properties of materials. Synthetic methods are grouped according to the physical state of reactants: solid, liquid, and gaseous. Fabrication methods of different shapes, such as fibers, thin films, and nanoparticles, are also covered. Students will learn: the basic principles of structural chemistry and generic structural types of solid state compounds, they will be able to apply them to other structural problems; mechanical, thermal, optical, electric, and magnetic properties of materials in correlation to their structure and judge new materials properties; to employ a variety of physico-chemical methods for the characterization of structure, morphology and properties of materials; to understand principles of classical solid-state and new soft synthetic techniques for variety of materials; to apply these synthetic methods to the fabrication new compounds and new morphologies;

**Osnova:**

- 1. Introduction, Materials Science, Materials Chemistry, Chemical Synthesis of Materials. 2. Basic Structural Chemistry. Inorganic Structure Types. Metals, Ionic, and Covalent Compounds. Defects. 3. Physicochemical Methods of Materials Characterization. 4. Electronic Structure of Solids, Chemical Bonding, Band Theory. 5. Electrical, Mechanical, Thermal, Optical, Magnetic Properties of Materials. 6. Direct Reaction of Solids, Kinetics, Synthesis of Spinel. 7. Carbothermal Reduction, Self-Sustaining Reactions, Combustion Reactions, Polymer Pyrolysis, Mechanochemical Synthesis, Microwave-Assisted Synthesis. 8. Dry High-Pressure Methods, Detonation Reactions, Diamond Synthesis, Hard Materials. 9. Vapor Phase Transport, Aerosol Routes, Flame Hydrolysis. 10. Precursor Methods, Flux or Molten Salt Method, Ionic Liquids, Sonochemical Synthesis. 11. Sol-Gel Methods, Hydrothermal Synthesis. 12. Zeolites, Mesoporous Materials, Layered Materials, Intercalation. 13. Growth of Single Crystals. 14. Synthesis of Thin Films, Chemical Vapor Deposition, Self-Assembled Monolayers. 15. Nanostructured Materials.

**Výukové metody:** The course taught in English. It consists of 14 lectures of 50 minutes each. Course materials, such as lecture slides, supplementary articles, tables, are available to students in the Information System of Masaryk University. Additional relevant lectures by visiting professors under INNOLEC program are part of the course in particular cases.

**Metody hodnocení:** There are 3 graded homeworks during the semester. At the end of the course every student will give a short presentation on a selected topic concerning materials chemistry. Written final exam worth 100 pts, minimum 50 pts to pass. Weights: final test 75%, homeworks 15%, presentation 10%.

**Literatura:**

- Schubert, Ulrich - Hüsing, Nicola. *Synthesis of Inorganic Materials*. Weinheim : Wiley-VCH, 2000. 396 s. ISBN 3-527-29550-X. info
- Müller, Ulrich. *Inorganic Structural Chemistry*. 2. vyd. : John Wiley & Sons., 1993. ISBN 0-471-93717-7. info
- Callister, William D., Jr. *Materials Science and Engineering, An Introduction*. 4. vyd. : John Wiley and Sons, 1997. ISBN 0-471-13459-7. info
- Smart, Lesley - Moore, Elaine. *Solid state chemistry : an introduction*. 2nd ed. London : Chapman & Hall, 1995. xiv, 379 s. ISBN 0-412-62220-3. info
- Segal, David. *Chemical Synthesis of Advanced Ceramic Materials*. Cambridge, UK : Cambridge University Press, 1989. ISBN 0-521-35436-6. info
- Interrante, L. V. - Hampden-Smith, M. J. *Chemistry of Advanced Materials, An Overview*. New York : Wiley-VCH, 1998. ISBN 0-471-18590-6. info
- Bruce, D. W. - O'Hare, D. *Inorganic Materials*. Chichester : John Wiley & Sons, 1997. ISBN 0-471-96036-5. info
- Yanagida, H. - Kunihito, K. - Miyayama, M. - Yamada, H. *The Chemistry of Ceramics*. : John Wiley & Sons, 1996. ISBN 0-471-96733-5. info
- Hoffmann, Roald. *Solids and Surfaces*. New York : VCH Publishers, 1988. ISBN 0-89573-709-4. info
- Kudas, T. - Hampden-Smith, M. *The Chemistry of Metal CVD*. Weinheim : VCH Weinheim, 1994. ISBN 3-527-29071-0. info
- Kratochvíl, Bohumil. *Chemie a fyzika pevných látek I*. Praha : Vysoká škola chemicko-technologická, 1994. 233 s. ISBN 80-7080-196-4. info
- Kratochvíl, Bohumil. *Základy fyziky a chemie pevných látek II*. Praha : Vysoká škola chemicko-technologická, 1990. 160 s. ISBN 80-7080-055-0. info
- West, Anthony R. *Basic Solid State Chemistry*. Second Edition. Chichester : John Wiley & Sons, 1999. ISBN 0-471-987565-5. info
- Mason, Timothy J. *Sonochemistry*. Oxford : Oxford University Press, 1999. 92 s. Oxford Chemistry Primers. ISBN 0-19-850371-7. info
- Mason, Timothy J - Lorimer, John P. *Applied Sonochemistry*. Weinheim : Wiley-VCH, 2002. 303 s. ISBN 3-527-30205-0. info
- Cheetham, A K - Day, Peter. *Solid State Chemistry - Compounds*. Oxford : Oxford University Press, 1992. 304 s. ISBN 0-19-855166-5. info
- Weller, Mark. *Inorganic Materials Chemistry*. Oxford, UK : Oxford University Press, 1994. ISBN 0-19-855799-X. info
- Jenkins, Ron - Snyder, Robert L. *Introduction to X-ray powder diffractometry*. New York : John Wiley & Sons, 1996. xxiii, 403. ISBN 0-471-51339-3. info
- Girolami, Gregory S. - Rauchfuss, Thomas B. - Angelici, Robert J. *Synthesis and technique in inorganic chemistry : a laboratory manual*. 3rd ed. Sausalito, Calif. : University Science Books, 1998. xiii, 272. ISBN 0-935702-48-2. info

- Cheetham, A K - Day, Peter. *Solid State Chemistry - Techniques*. Oxford : Oxford University Press, 1987. 398 s. ISBN 0-19-855286-6. info
- Holzapfel, Wilfried B - Isaacs, Neil S. *High-Pressure Techniques in Chemistry and Physics*. Oxford : Oxford University Press, 1997. 388 s. The Practical Approach in Chemistry Series. ISBN 0-19-855811-2. info

### 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). Doporučované 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 (silová 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 PhD.](#)

**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

## C8000 Oborový seminář II

**Vyučující:** [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [prof. RNDr. Jiří Pinkas Ph.D.](#)

**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:**

- 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 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)

## C8070 Molekulová spektroskopie

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

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

**Cíle předmětu:** Přednáška je zaměřena na elektronovou spektroskopii komplexních sloučenin v UV/VIS oblasti a vibrační infračervenou a Ramanovu spektroskopii v MIR oblasti. Stručně jsou diskutována vibrační spektra krystalů a polymerů a principy MW a ESCA spektroskopie.

## Osnova:

- Elektronová spektra komplexních sloučenin: absorpční spektra komplexů v UV a VIS oblasti, typy elektronových přechodů, výběrová pravidla, intenzity a pološířky d-d-pásů, spin-orbitální interakce. Teorie ligandového pole (LP): interpretace absorpčních spekter komplexů, konstrukce a využití energetických diagramů podle Tanabeho a Sugana. Teorie molekulových orbitalů (MO): interpretace absorpčních spekter komplexů, spektra přenosu náboje, srovnání s přístupem teorie LP. ESCA spektroskopie. Molekulová vibrační spektroskopie: podstata normálních vibrací, translační, rotační a vibrační stupně volnosti, vibrační kvantová čísla, harmonické, "horké" a kombinační pásy, valenční a deformační vibrace, energetická degenerace vibrací. Infračervená a Ramanova spektroskopie: princip vzniku infračervených absorpčních a Ramanových spekter, vliv skupenství vzorku na charakter spekter, intenzita pásů v infračervených a Ramanových spektrech, polarizace Ramanových čar, aplikační možnosti obou metod při studiu struktury anorganických sloučenin, nelineární efekty rozptylu. Mikrovlnná spektroskopie. Využití teorie grup při analýze vibračních spekter: vibrační reprezentace, symetrické vlastnosti translačního a rotačního pohybu molekul, symetrické vlastnosti dipólového momentu a polarizovatelnosti, výběrová pravidla pro fundamentální, kombinační i harmonické vibrace, pravidlo alternativního zákazu. Interpretace vibračních spekter: empirická pravidla pro interpretaci vibračních spekter, charakteristické frekvence, metoda izotopické substituce, součinné a součtové pravidlo, Fermiho rezonance, aproximativní výpočet kvadratických potenciálních konstant a vazebných řádů, princip normální souřadnicové analýzy. Symetrie řetězovitých a vrstevnatých polymerů: šroubové osy a skluzné roviny, jednorozměrná mřížka, grupy translací a perioda identity, symetrie polymerních řetězců a přímkové grupy, rovinné mřížky, symetrie vrstevnatých polymerů a jiných plošných útvarů, rovinné a vrstevné grupy. Symetrie krystalů: prostorové mřížky a krystalografické soustavy, holodrie a meroedrie, elementární, primitivní a symetrická primitivní buňka, 14 Bravaisových mřížek, 32 krystalografických tříd, prostorové grupy a jejich podgrupy, ekvivalentní místa a polohová symetrie, symbolika prostorových grup a mezinárodní tabulky pro krystalografii. Struktura reálných krystalů a symetrie: morfologie krystalu a bodová grupa symetrie, isostrukturmost a isomorfie, polymorfie a fázové přechody, rotace částic v krystalech a její vliv na strukturu, orientačně neuspořádané struktury, hypersymetrie, četnost výskytu prostorových grup v reálných krystalových strukturách. Vibrační spektra krystalů: vliv skupenství na vibrační spektra, spektra matricově izolovaných specií, vnitřní a vnější vibrace, stanovení vibrační reprezentace krystalů prostřednictvím korelační analýzy, orientace grup polohové symetrie v základní buňce. Vibrační spektra řetězovitých, vrstevnatých a prostorových polymerů: vibrační reprezentace polymerních řetězců, korelační analýza a vibrační spektra krystalických polymerů, vibrační reprezentace krystalů tvořených atomy nebo jednoatomovými ionty.

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška

**Literatura:**

- Ferraro, John R. - Nakamoto, Kazuo. *Introductory raman spectroscopy*. Boston : Academic Press, 1994. xi, 370 s. ISBN 0-12-253990-7. info
- Turrell, George. *Infrared and raman spectra of Crystals*. London : Academic press, 1972. xii, 384 s. ISBN 0-12-705050-7. info
- Horák, Milan - Papoušek, Dušan. *Infračervená spektra a struktura molekul : použití vibrační spektroskopie při určování struktury molekul*. 1. vyd. Praha : Academia, 1976. 836 s. info
- Toužín, Jiří-Příhoda, Jiří. *Spektrální a magnetické metody studia anorganických sloučenin*. 1.vyd.Praha:Státní pedagogické nakladatelství, 1986.
- Toužín, Jiří - Černík, Miloš. *Vibrační spektroskopie molekul a krystalů*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1980. 168 s. info

## C8400 Kvantová chemie pevných látek, výpočty elektronové struktury

**Vyučující:** [prof. RNDr. Mojmir 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, strukturální 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 prvoprincipielního 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. (příř 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. Oxymerkurace. Hydroborace. Epoxidace. Adice na alkyne a kumuleny. 5. Nukleofilní adice na karbonyl. Adice nukleofilu. Hydrolýza. Grignardova reakce. 6. Eliminační reakce. Typy eliminačních reakcí a jejich přechodový stav. Stereochemie. Pyrolitické eliminace. 7. Elektrofilní aromatická substituce. Kvantitativní měření SEAr rychlostí. Ipso-substituce. Reaktivita polycyklických aromatických sloučenin. 8. Nukleofilní aromatická a vinylová substituce. SNAr reakce. Nukleofilní substituce benzyňového 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: Fyzikální principy a mechanismy organických reakcí. Veda, Bratislava 1989.
- O. Červinka: Mechanismy organických reakcí. SNTL/ALFA, Praha 1981.

## **C8510 Mechanismy organických reakcí - seminář**

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

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

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

**Osnova:**

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

Hofmannovo odbourávání; Hydroborace; Mannichova reakce; Michaelova adice; Mitsunobuova reakce; Norrishova reakce typu II; Perkinova kondenzace; Sandmayerova reakce; Stilleho reakce; Suzukiho reakce; Swernova oxidace; Wittigova reakce.

**Výukové metody:** Teoretická příprava.

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

**Literatura:**

- E. V. Anslyn, D. A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, Sausalito, California 2005. ISBN 1-891389-9
- A: Jurášek: Fyzikální principy a mechanismy organických reakcí. Veda, Bratislava 1989.
- O. Červinka: Mechanismy organických reakcí. SNTL/ALFA, Praha 1981.

## C8700 Technologie chemických výrob

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Technologie odpadních vod, technické plyny, výroba vodíku a oxidu uhličitého. 2. Průmysl síry, výroba kyseliny 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 druh polymerů, technologie zpracování plastů.

**Výukové metody:** Přednáška

**Metody hodnocení:** zkouška písemná a ústní

**Literatura:**

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

- Pichler, Jiří. *Chemická technologie základních organických látek*. Vyd. 1. Brno : Masarykova univerzita, 1992. 102 s. ISBN 80-210-0553-. info
- Mleziva, Josef. *Polymery - výroba, struktura, vlastnosti a použití*. 1. vyd. Praha : Sobotáles, 1993. 525 s. ISBN 80-901570-4-1. info

## C8780 Organic Photochemistry

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

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf 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. nedělí 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:** Ústní 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

### C8840 Chemie makrocyclických sloučenin

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Úvod do chemie makrocyclů (nomenklatura, přírodní makrocyclky, význam).

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

**Výukové metody:** teoretická příprava

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

**Literatura:**

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

## 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, uhličitan, 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. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: z. Jiná možná ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** Samostatný projekt v pokročile výpočetní chemii.

### Osnova:

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

**Výukové metody:** Práce na projektu.

**Metody hodnocení:** Diskuse o projektu, protokol

### Literatura:

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

## C8870 Syntéza a analýza nových materiálů

**Vyučující:** [doc. RNDr. Pavel Brož Ph.D.](#), [doc. RNDr. Zdeněk Losos CSc.](#), [prof. RNDr. Jiří Pinkas Ph.D.](#)

**Rozsah:** 0/5/0. 5 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: kz. Jiná možná ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Studenti získají v laboratorním cvičení: základní přehled o nejvýznamnějších syntetických metodách používaných pro přípravu nových kovových a nekovových anorganických materiálů, jako jsou reakce za vysokých teplot mezi tuhými reagenty nebo plynnou a pevnou látkou, koprecipitační metoda, hydrotermální syntéza, supramolekulární templátování a sonochemická metoda; seznámí se základními charakterizačními technikami, jako jsou rentgenová prášková difrakce, stanovení měrného povrchu metodou BET, termická analýza, NMR spektroskopie v pevné fázi, optická a elektronová mikroskopie a mechanické zkoušky materiálů.

**Osnova:**

- Seznam úloh předmětu C8870 Syntéza a analýza nových materiálů (laboratorní cvičení): 1. Příprava YBCO supravodiče. 2. Příprava zeolitu X. 3. Příprava mezoporézního materiálu MCM-41. 4. Příprava binární Pb/Sn slitiny a konstrukce fázového diagramu. 5. Příprava nanostrukturního Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> sonochemickou metodou. 6. Chemicko-tepelné zpracování materiálů. 7. Stanovení měrného povrchu. 8. Termická analýza. 9. Elektronová mikroskopie. 10. Rentgenová prášková difrakce. 11. Optická mikroskopie. 12. Mechanické vlastnosti. 13. NMR spektroskopie v pevné fázi.

**Výukové metody:** Předmět C8870 je organizován formou kolovacího praktika. Přihlášení studenti jsou rozděleni do několika skupin po 3-4 osobách. Dle svého zaměření si vyberou šest úloh z nabídky 13 experimentů s vyváženým zastoupením syntetických a analytických úloh. Studenti vykonají jednotlivé úlohy v různých laboratořích Ústavu Chemie a Ústavu geologických věd. Úloha 12 Mechanické vlastnosti pevných látek je prováděna formou společného demonstračního zaměstnání na mechanické zkušebně ÚMI VUT vybavené příslušným přístrojovým zařízením.

**Metody hodnocení:** Před absolvováním každé úlohy bude provedena zkouška znalostí teoretického základu a postupu práce. Z každé úlohy bude vypracován protokol, který je hodnocen. Závěrečný test bude obsahovat otázky k principům všech úloh.

**Literatura:**

- Literatura uvedena u jednotlivých úloh
- Girolami, Gregory S. - Rauchfuss, Thomas B. - Angelici, Robert J. *Synthesis and technique in inorganic chemistry : a laboratory manual*. 3rd ed. Sausalito, Calif. : University Science Books, 1998. xiii, 272. ISBN 0-935702-48-2. info
- Cheetham, A K - Day, Peter. *Solid State Chemistry - Techniques*. Oxford : Oxford University Press, 1987. 398 s. ISBN 0-19-855286-6. info
- Cheetham, A K - Day, Peter. *Solid State Chemistry - Compounds*. Oxford : Oxford University Press, 1992. 304 s. ISBN 0-19-855166-5. info
- Pinkas, Jiří - Reichlová, Vendula - Zbořil, Radek - Moravec, Zdeněk - Bezdička, Petr - Matejková, Jiřina. Sonochemical synthesis of amorphous nanoscopic iron(III) oxide from Fe(acac)<sub>3</sub>. *Ultrasonics Sonochemistry*, Elsevier, 15, 3, od s. 257-264, 8 s. ISSN 1350-4177. 2008. info

## C8880 Vybrané metody analýzy pevných látek

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

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

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

**Osnova:**

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

- 9. Elektronová spektrometrie ESCA, spektrometrie Augerových elektronů.

**Výukové metody:** teoretická příprava

**Metody hodnocení:** přednáška, ústní zkouška

**Literatura:**

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

## C8885 Supramolekulární chemie

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Vymezení předmětu supramolekulární chemie, základní pojmy a principy. Povaha supramolekulárních interakcí. (Iontové interakce, dipolární interakce, vodíková vazba, kation-pí interakce, pí-pí stacking, van der Waalsovy síly, Hydrofobní efekt.
- 2. Rozpoznávání molekul. Rozpoznávání a selektivita. Termodynamická a kinetická selektivita. Molekulární receptory. Chelátový a makrocyclický efekt. Preorganizace a komplementarita. Základní typy rozpoznávání, kationty, anionty, neutrální molekuly.
- 3. Rozpoznávání kationtů. Crown ethery. Cryptandy. Sferandy. Selektivita komplexace kationtů. Komplexace organických kationtů, vazba amoniového kationtu.
- 4. Calix[n]areny. Struktura a konformace kalixarenů, jednoduché chemické transformace kalixarenů. Komplexace kationtů, aniontů a neutrálních molekul kalixareny.
- 5. Rozpoznávání aniontů. Biologické receptory aniontů. Rozpoznávání aniontu a kationtu v závislosti na pH. Guadiniové, organometalické a neutrální receptory. Komplexace hydridového aniontu.
- 6. Rozpoznávání neutrálních molekul. Anorganické a organické klatráty (zeolity, močovina, dianin ad.). Cyklodextriny. Supramolekulární chemie fullerenů.
- 7. Struktura a stabilita molekulárních komplexů. Definice komplexační konstanty. Určení stechiometrie komplexu. Nejčastěji používané metody studia komplexů.
- 8. Dendrimery. Příprava a vlastnosti dendrimerů. Supramolekulární aplikace dendrimerů.
- 9. Supramolekulární syntéza, krystalové inženýrství. Mezimolekulové interakce. Růst krystalu. Strategie designu. Využití H-vazby, pí-pí stackingu a dalších interakcí.
- 10. Samovolná organizace (self-assembly, SA). Biochemická SA. SA v syntéze. Katenany a rotaxany. Helikáty, Programované supramolekulární syntézy. Uspořádávání
- 11. Supramolekulární reaktivita a katalýza. Příklady receptorů uplatňujících se v katalýze. Biologická mimika. Různé modely enzymových systémů.
- 12. Supramolekulární interakce v transportních procesech. Nosiče využívané v jednotlivých typech transportů. Povrchově aktivní látky. Micely, vesikuly. Preorganizace surfaktantů.
- 13. Supramolekulární "zařízení". Přenos informace, semiochemie. Supramolekulární fotochemie. Fotonická zařízení. Supramolekulární elektronická zařízení - přepínače, vodiče a polovodiče, usměrňovače. Nelineární optické materiály.
- 14. Kapalně krystaly. Povaha a struktura kapalných krystalů. Chemické struktury uplatňující se při konstrukci kapalných krystalů. Aplikace kapalných krystalů.

**Výukové metody:** Přednášky



**Metody hodnocení:** Ústní zkouška, případně kolokvium.

**Literatura:**

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

## C8950 NMR - Strukturní analýza

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

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

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

**Osnova:**

- **1. Některé aspekty NMR** - úvod, metody magnetické rezonance, vznik NMR signálu, typy jaderných interakcí, chemický posun, interakční konstanta, příklady, Fourierova transformace - relaxace jader (inversion recovery), selektivní excitace, potlačení signálu rozpouštědla, NOE; **2. Konstrukce spektrometrů** - magnety, sondy, kyvety a propojení s HPLC, MS; **3. Editační techniky** - spinové echo, APT - přenos polarizace, INEPT, DEPT; **4. NMR spektroskopie ve více dimenzích - homonukleární korelace** - korelační spektroskopie (COSY) - interakce dalekého dosahu (LR-COSY, Relayed COSY) - TOCSY; **5. Heteronukleární korelace** - jednovazebné (HETCOR) - dalekého dosahu (LR-HETCOR, COLOC); **6. Měření J konstant** - J spektroskopie - jiné techniky-korelace chemických posunů, časová doména; **7. Interakce dipól-dipól** - selektivní NOE - 2D NOESY; **8. Vícekvantová spektroskopie** - MQF-COSY - INADEQUATE; **9. NMR spektroskopie jiných jader než  $^1\text{H}$  a  $^{13}\text{C}$**  -  $^{15}\text{N}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{77}\text{Se}$  ( $^{19}\text{F}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{111}\text{Cd}$  a  $^{113}\text{Cd}$ ,  $^{117}\text{Sn}$  a  $^{119}\text{Sn}$ ,  $^{125}\text{Te}$ ,  $^{195}\text{Pt}$  a  $^{207}\text{Pb}$ ); **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, Siegmur - Kalinowski, Hans - Otto - Berger, Stefan. *150 and more basic NMR experiments :a practical course*. 2nd exp. ed. Weinheim : Wiley-VCH, 1998. 595 s. ISBN 3-527-29512-7. info
- Braun, Siegmur - Kalinowski, Hans - Otto - Berger, Stefan. *100 and more basic NMR experiments :a practical course*. Weinheim : VCH Verlagsgesellschaft, 1996. xii, 418 s. ISBN 3-527-29091-5. info
- <http://staffold.vscht.cz/nmr/subpages/predmet.html>

### C9000 Oborový seminář III

**Vyučující:** [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [prof. RNDr. Jiří Pinkas Ph.D.](#)

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

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

**Osnova:**

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

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

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

**Literatura:**

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

### C9001 Diplomová práce III

**Vyučující:** vedoucí práce

**Rozsah:** 0/0/12. 12 kr. Ukončení: kz.

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

**Osnova:**

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

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

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

**Literatura:**

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

### 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 Hückelova 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. (příf 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 jednoelektronových 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

## F5170 Úvod do fyziky plazmatu

**Vyučující:** [doc. Mgr. Lenka Zajíčková Ph.D.](#)

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

**Cíle předmětu:** Přednáška je obecným úvodem do fyziky plazmatu a je zaměřena na studenty, kteří se zatím s tímto pojmem nesetkali. Studenti, kteří ji absolvují, získají základy fyziky plazmatu založené na statistické kinetické teorii a magnetohydrodynamických rovnicích. Na konci tohoto kurzu bude student schopen: vysvětlit a správně definovat pojem plazma; porozumět pojmu rozdělovací funkce a jejímu použití pro výpočet makroskopických veličin; reprodukovat Boltzmannovu kinetickou rovnici i v případě existence srážek částic; reprodukovat makroskopické transportní rovnice a vysvětlit fyzikální význam jednotlivých jejich členů; použít transportní rovnice za zjednodušujících předpokladů pro pochopení kolektivních jevů v plazmatu (např. vodivost a dielektrická odezva plazmatu, difúze a plazmové oscilace).

**Osnova:**

- Kurz je rozčleněn do 11 témat:
- 1. Úvod (kritéria pro definici plazmatu, stručné shrnutí metod vytváření plazmatu a jeho aplikací)
- 2. Pohyb částic v elektromagnetických polích (homogenní statická pole, nehomogenní magnetické pole, pomalé časově proměnné elektrické pole)
- 3. Základy kinetické teorie plazmatu (fázový prostor, rozdělovací funkce rychlostí a její fyzikální význam, Boltzmannova kinetická rovnice - BKR, Relaxační model pro srážkový člen)
- 4. Střední hodnoty a makroskopické veličiny (střední hodnota fyzikální veličiny, driftová a tepelná rychlost, definice toku, tok částic, tenzor toku hybnosti, tenzor tlaku, vektor toku tepla, tenzor toku tepelné energie, tenzor toku celkové energie, momenty rozdělovací funkce)
- 5. Rovnovážný stav (rozdělovací funkce v rovnovážném stavu, vlastnosti Maxwellova rozdělení, řešení BKR pro rovnovážný stav za přítomnosti vnějších sil, Sahova rovnice)
- 6. Interakce částic v plazmatu (srážkové procesy, kinetika a dynamika elastických binárních srážek, úhel rozptylu, diferenciální a celkový účinný průřez, účinný průřez pro přenos hybnosti, účinné průřezy pro Coulombovský interakční potenciál v případě Debyeova stínění, střední volná dráha, rychlostní konstanta)
- 7. Makroskopické transportní rovnice pro jeden typ částic (momenty Boltzmannovy rovnice, obecná transportní rovnice, rovnice kontinuity, pohybová rovnice, rovnice energie, model studeného a teplého plazmatu)
- 8. Makroskopické rovnice pro vodivou kapalinu (makroskopické proměnné popisující plazma jako vodivou kapalinu, rovnice kontinuity, pohybová rovnice, rovnice energie, elektrodynamické rovnice pro vodivou kapalinu, zobecněný Ohmův zákon)
- 9. Vodivost plazmatu a difúze (Langevinova rovnice a její linearizace, stejnosměrná vodivost a pohyblivost elektronů v případě izotropního plazmatu a za existence magnetického pole, střídavá vodivost a elektronová pohyblivost, plazma jako dielektrikum, difúze volných elektronů, difúze elektronů v magnetickém poli, ambipolární difúze)
- 10. Některé základní jevy v plazmatu (elektronové plazmové oscilace, debyeovské stínění, stěnová vrstva)
- 11. Boltzmannův a Fokker-Planckův srážkový člen (odvození Boltzmannova srážkového členu, Boltzmannův srážkový člen ve slabě ionizovaném plazmatu, odvození Fokker-Planckova srážkového členu)

**Výukové metody:** Kurz se skládá z přednášek vysvětlujících teorii všech probíraných témat a cvičení, na kterém studenti aktivně spolupracují, protože sami předvádějí řešení zadaných příkladů. Zadáání příkladů je známo dopředu a rovnoměrně distribuováno mezi studenty. Studenti si řešení připravují jako domácí úlohy. Jestliže se nemohou osobně účastnit cvičení kvůli stáží v zahraničí nebo kombinované formě studia mohou ukázat nebo poslat řešení příkladů cvičícímu i mimo cvičení. Kromě toho musí studenti úspěšně zodpovědět Odpovědníky, které testují základní znalosti dosažené během kurzu.

**Metody hodnocení:** Kurz může být ukončen zkouškou nebo kolokviem. Požadavky na připuštění ke zkoušce jsou následující: - aktivní účast na cvičeních, která musí být ukončena získáním dostatečného počtu bodů za řešené příklady a písemný test, - úspěšné zodpovězení všech Odpovědníků. Zkouška se skládá z: - písemné a - ústní části. V písemné části student prokáže schopnost samostatně řešit příklady související s probíranou látkou. Ústní část otestuje pochopení teorie. K ústní části zkoušky jsou připuštěni pouze ti studenti, kteří úspěšně prošli písemnou částí. Hodnocení studenta je založeno na standardní klasifikaci. V úvahu se berou výsledkem obou částí zkoušky. Požadavky na udělení kolokvia: - účast na minimálně 70% cvičení nebo písemné odevzdání

minimálně 70% řešených problémů, - úspěšně zodpovězení všech Odpovědníků, - závěrečná diskuze tématu s učitelem.

#### Literatura:

- Bittencourt, J. A. *Fundamentals of plasma physics*. 3rd ed. New York : Springer, 2004. xxiii, 678. ISBN 0-387-20975-1. 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 rrtg 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, piezoelectricita, 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. *Geochemija prirodnych vod : The geochemistry of natural waters (orig.)*. Moskva : Mir, 1985. 439 s. info

## GE091 Mineralogie a geochemie

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

**Rozsah:** 2/0. 3 kr. Ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** Hlavním cílem kurzu je porozumění základům mineralogie a geochemie a jejich dílčích disciplín (Úvod do mineralogie a geochemie, Morfologická a strukturní krystalografie, Fyzikální vlastnosti minerálů, Krystalochemie a Systematická mineralogie) V systematické části mineralogie je třeba si osvojit chemické složení, kryst. soustavu, strukturu, fyzikální a chemické vlastnosti, vznik a využití nejdůležitějších minerálů v rozsahu sylabu přednášky. Výuka geochemie je zaměřena na vznik a vývoj vesmíru, sluneční soustavy, planety Země, stavbu planety Země a hlavní geologicko-geochemické procesy v zemské kůře. Komentovány jsou také antropogenní vlivy na vývoj chemismu povrchu zemské kůry.

**Osnova:**

- 1/ Úvod do mineralogie a geochemie - vznik a historický vývoj obou vědních disciplín, postavení mineralogie a geochemie v systému přírodních věd, jejich rozdělení a objekty výzkumu, praktický význam - definice minerálu 2/ Morfologická krystalografie - definice krystalu - prvky morfologického omezení krystalů, tvary jednoduché, spojky, monokrystal, srostlice - osní kříže, osní úhly, indexování ploch a krystalových tvarů - základy měření krystalů, krystalografické projekce (gnomonická a stereografická) - základní krystalografické zákony a pravidla - prvky morfologické souměrnosti krystalů - oddělení souměrnosti a krystalové soustavy (osní kříže, základní krystalové tvary, příklady minerálů a sloučenin) 3/ Strukturní krystalografie - krystal z pohledu strukturní krystalografie, podmínky jeho vzniku, fáze krystalizačního procesu - pravidelné uspořádání bodů v prostoru, 5 typů rovinných mřížek a 14 Bravaisových prostorových buněk, symetrie jednorozměrných řad, rovinných sítí a prostorových mřížek - šroubové osy a roviny posunutého zrcadlení - bodové a prostorové grupy - určování krystalové struktury minerálů (difrakce RTG-zářením, prášková metoda, identifikace krystalických látek) 4/ Fyzikální vlastnosti minerálů - barva a prostupnost světla, lesk, hustota, tvrdost, štěpnost, magnetismus, luminiscence, radioaktivita - úvod do krystalové optiky a možnosti jejího využití v diagnostice minerálů a sloučenin 5/ Krystalochemie - stavební částice minerálů, jejich rozměry, vazebné síly v krystalech, koordinační polyedry, Paulingova pravidla, - strukturní klasifikace minerálů (přehled mineralogického systému na příkladech) - izostrukturnost, izomorfnost, polymorfie, polytypie, pseudomorfie (příklady), pevné roztoky 6/ Systematická mineralogie U probraných minerálů je třeba znát chemické složení, kryst. soustavu, strukturu, fyzikální a chemické vlastnosti, vznik a využití v rozsahu přednášky: - prvky (Cu, Ag, Au, As, diamant, grafit, síra) - sirníky (Struktury tetraedrické: sfalerit, chalkopyrit. Struktury oktaedrické: galenit, pyrhotin, nikelin. Struktury s jiným uspořádáním: molybdenit, cinabarit, argentit. Komplexní sirníky: pyrit, markazit, arzenopyrit, antimonit, tetradrit, realgar, auripigment.) - halovce (halit, sylvín, fluorit, kryolit, carnallit) - oxidy (Struktury tetraedrické: minerály SiO<sub>2</sub>, periklas. Struktury oktaedrické: hematit, korund, ilmenit, rutil, kasiterit. Struktury kombinované tetraedrické a oktaedrické: spinelidy - magnetit, spinel, chromit. Kubická struktura: uraninit. S jiným uspořádáním: kuprit. Limonit a bauxit.) - dusičnany (ledek čilský) - uhličitany (kalcit, magnezit, siderit, dolomit, aragonit, malachit, azurit) - sírany (Bezvodé : anhydrit, baryt. Vodnaté: sádrovec, skalice, kamence) - fosfáty ( xenotim, monazit, apatit, fosfority, pyromorfit) - silikáty (Nesosilikáty: olivín, granáty, zirkon, topaz, titanit. Sorosilikáty: epidot. Cyklosilikáty: beryl, turmalíny. Inosilikáty: amfiboly, pyroxeny. Fylosilikáty: slídy, mastek, kaolinit, serpentín. Tektosilikáty: K-živce, plagioklasy, zeolity) 7/ Geochemie - vznik a vývoj vesmíru, sluneční soustavy, planety Země - stavba planety Země - geologicko-geochemické procesy v zemské kůře: magmatický proces, metamorfní proces, zvětvávání a sedimentace

**Výukové metody:** teoretická příprava

**Metody hodnocení:** Přednášky. Jako ukončení doporučen klasifikovaný zápočet.

**Literatura:**

- Chvátal, Marek. *Mineralogie pro 1. ročník :krystalografie*. 1. vyd. Praha : Karolinum, 1999. 169 s. ISBN 80-7184-998-7. info
- *Geochemie [Bouška, 1980]*. Edited by Vladimír Bouška. Praha : Academia, 1980. 555 s. info
- Slavík, František - Novák, Jiří - Kokta, Jaroslava. *Mineralogie [Slavík, 1974]*. 5. přeprac. a dopl. vyd. Praha : Academia, 1974. 486 s. info
- Bouška, Vladimír - Kašpar, Pavel. *Speciální optické metody : studium minerálů v procházejícím světle*. Vyd. 1. Praha : Academia, 1983. 198 s. + 1. info

## G7501 Fyzikální geochemie

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

**Rozsah:** 2/1. 5 kr. Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Přednáška navazuje na základní principy, probrané v kurzu Geochemie (III. roč.) a je pokročilým kurzem magisterského studia geologie. Hlavní pozornost je věnována kvantitativnímu posouzení stability geologických systémů (minerálů a hornin, fluid) za podmínek jejich existence v zemské kůře a možnosti jejich přeměn. Značná část je také věnována studiu dynamiky přeměn geologických systémů a možnostem jejich modelování. Úspěšné zvládnutí kurzu umožní posluchačům vlastní aplikaci nejnovějších kvantitativních postupů fyzikální geochemie při řešení diplomových témat. Jedná se o širokou škálu problémů otázek geneze (podmínek T, p a složení) a časového vývoje geologických systémů od vyvřelých hornin až po hodnocení současných změn v atmosféře Země.

**Osnova:**

1. Úvod, historie, základní pojmy,
2. Principy: První a druhý zákon termodynamiky,
3. Gibbsova funkce,
4. Chemický potenciál roztoků,
5. Procesy: Jednosložkové soustavy,
6. Vícesložkové soustavy I,
7. Vícesložkové soustavy II,
8. Pevné roztoky,
9. Chemicky reaktivní systémy: Rovnováha,
10. Acidobazické a srážecí rovnováhy,
11. Komplexotvorné rovnováhy,
12. Rovnovážná elektrochemie,
13. Dynamika: Rychlost geochemických procesů,
14. Modelování: Principy modelování rovnováh a dynamiky,
15. Ideální a reálné systémy

**Výukové metody:** přednášky, praktická cvičení, průběžné testy

**Metody hodnocení:** Ve cvičení jsou pravidelně zadávány krátké kontrolní testy na zvládnutí základních pojmů a principů - je nutná 70% úspěšnost v testech. Zkouška po splnění podmínek - písemnou formou.

**Literatura:**

- Zeman, Josef. *Základy fyzikální geochemie*. Vyd. 1. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1990. 212 s. ISBN 80-210-0121-6. info
- Anderson, Gregor Munro - Crerar, David A. *Thermodynamics in geochemistry : the equilibrium model*. New York : Oxford University Press, 1993. 588 s. ISBN 0-19-506464-. info
- Henderson, Paul. *Neorganická geochemie : Inorganic geochemistry (Orig.)*. Moskva : Mir, 1985. 338 s. info
- Drever, James I. *The Geochemistry of Natural Waters*. : Prentice Hall, 1997. 450 s. ISBN 0-13-272790-0. info

## G8601 RTG-prášková difraktometrie

**Vyučující:** [RNDr. Václav Vávra Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0. 3 kr. Ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** Výběrová přednáška pro studenty se zaměřením na mineralogii a technickou mineralogii a petrografii. Přednáška seznamuje studenty s používanými technikami, které souvisí s rtg práškovou difrakcí a prezentuje vhodnost resp. nevhodnost jednotlivých metod a postupů při výběru různých přístrojů a načítacích

režimů. Studenty seznamuje s dostupným softwarem a základními postupy při vyhodnocování rtg práškových záznamů.

**Osnova:**

- vznik rtg záření, rtg lampy, absorpce záření, interakce rtg svazku s hmotou
- nejpoužívanější typy difraktometrů a jejich geometrie
- monochromátory a jejich využití v práškové difrakci
- detektory rtg záření, principy a možnosti využití
- příprava vzorků pro práškovou difrakční analýzu
- software pro práškovou difrakci, softwarový komplet Visual Xpow
- základní principy měření a vyhodnocování rtg difrakčních práškových záznamů

**Výukové metody:** pravidelná týdenní výuka

**Metody hodnocení:** zápočtový test

**Literatura:**

- *Difrakcia na polykrystalických látkách*. Edited by L. Smrčok. Bratislava : R & D Print, 1994. 458 s. ISBN 80-85488-01-9. info
- Johan, Zdeněk - Rotter, Robert - Slánský, Ervín. *Analýza látek rentgenovými paprsky*. Vyd. 1. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1970. 257 s. info

## JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška

**Vyučující:** [Mgr. Věra Hranáčová](#)

**Rozsah:** 0/0. 2 kr. Ukončení: zk.

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

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** Zkouška

**Metody hodnocení:** Písemný test, ústní zkouška

**Literatura:**

- Jeremy Comfort. *Effective Presentations*. OUP 2000.
- Douglas Bell: *Passport to Academic Presentations*. Garnet 2008.
- *Academic vocabulary in use*. Edited by Michael McCarthy - Felicity O'Dell. Cambridge : Cambridge University Press, 2008. 176 s. ISBN 978-0-521-68939. info
- Keith Kelly: *Science*. Macmillan 2008
- *Key words in science & technology : helping learners with real English*. Edited by Bill Mascull. 1st ed. London : Harper Collins Publishers, 1997. xii, 210 s. ISBN 0-00-375098-1. info
- *Academic writing course : study skills in English*. Edited by R.R Jordan. 1st ed. Essex : Longman, 1999. 160 s. ISBN 0-582-40019-8. info
- *English for science*. Edited by Fran Zimmerman. New Jersey : Regents/Prentice Hall, 1989
- Donovan, Peter. *Basic English for Science*. 10. vyd. Oxford : University Press, 1994. 153 s. ISBN 0-19-457180-7. info



- *Nucleus ; English for science and technology*. Edited by Martin Bates - Tony Dudley-Evans. info
- Physics:Reader.Ivana Tulajová, Masarykova univerzita Přírodovědecká fakulta 2000
- Plummer, Charles C. - McGeary, David. *Physical geology :student study art notebook*. 7th ed. Dubuque : Wm. C. Brown Communications, 1996. 161 s. ISBN 0-697-28732-7. info
- Strahler, Alan H. - Strahler, Arthur Newell. *Introducing physical geography*. 4th ed. Hoboken, N.J. : J. Wiley, 2006. xxv, 728 s. ISBN 0-471-67950-X. info
- Murphy, Raymond. *English grammar in use :a self-study reference and practice book for intermediate students of English : with answers*. 3rd ed. Cambridge : Cambridge University Press, 2004. x, 379 s. ISBN 0-521-53762-2. info
- Cunningham, Sarah - Bowler, Bill. *Headway : intermediate : pronunciation*. 1. vyd. Oxford : Oxford University Press, 1990. xi, 112 s. ISBN -19-433968-8. info
- +Any materials aimed at preparation for B2 level examinations(e.g. FCE, TOEFL)