

MASARYKOVA UNIVERZITA  
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA



---

---

# ŽÁDOST O AKREDITACI

*Navazujícího magisterského studijního programu*

**C h e m i e**

*Obor*

**S t r u k t u r n í   c h e m i e**

---

---

**Brno, říjen 2011**

# OBSAH

OBSAH.....	1
A – Žádost o akreditaci / rozšíření nebo prodloužení doby platnosti akreditace bakalářského / magisterského stud. programu .....	3
Obor: Strukturní 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.....	21
F – Související vědecká, výzkumná, vývojová, umělecká a další tvůrčí činnost .....	22
I – Uskutečňování akreditovaného stud. programu mimo sídlo vysoké školy .....	23
D – Charakteristika studijních předmětů.....	24
CA000 Oborový seminář IV .....	24
CA001 Diplomová práce IV .....	24
CB070 Proteinová krystalografie .....	24
CB080 Proteinová krystalografie - seminář .....	25
C2110 Operační systém UNIX a základy programování .....	25
C2150 Zpracování informací a vizualizace v chemii .....	26
C5020 Chemická struktura.....	27
C5030 Chemická struktura - seminář.....	27
C5060 Metody chemického výzkumu.....	28
C5300 Statistická termodynamika .....	29
C5320 Fyzikálně chemické základy NMR.....	30
C5440 Separční metody .....	31
C5500 Stereochemistry of Organic Compounds.....	32
C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie .....	33
C6290 Atomová absorpční spektrometrie.....	33
C6310 Symetrie molekul.....	34
C6320 Chemická kinetika .....	35
C6330 Chemická kinetika - seminář .....	35
C6790 Hmotnostní spektrometrie .....	36
C6800 Multinukleární NMR spektroskopie .....	36
C6950 Chemická exkurze .....	38
C6960 Odborná praxe .....	38
C7000 Oborový seminář I .....	38
C7001 Diplomová práce I .....	39
C7031 Atomová spektrometrie .....	39
C7041 Molekulová spektrometrie.....	40
C7410 Struktura a reaktivita .....	41
C7415 Struktura a reaktivita - seminář .....	42
C7460 Identifikace organických látek - cvičení .....	42
C7777 Zacházení s chemickými látkami.....	43
C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I .....	43
C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení.....	44
C7999 Advanced Methods of NMR Spectroscopy .....	44
C8000 Oborový seminář II.....	45
C8001 Diplomová práce II.....	45
C8500 Mechanismy organických reakcí .....	45
C8510 Mechanismy organických reakcí - seminář .....	46
C8800 Rtg strukturní analýza.....	47
C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II .....	47
C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení.....	48
C8862 Výpočty volných energií - cvičení.....	48
C8863 Výpočty volných energií .....	49
C8880 Vybrané metody analýzy pevných látek .....	49
C8885 Supramolekulární chemie .....	50
C8950 NMR - Strukturní analýza .....	51
C8951 NMR spektroskopie pevného stavu - základní principy a aplikace v chemii. ....	52
C8953 NMR - Strukturní analýza - seminář .....	53

C9000	Oborový seminář III .....	53
C9001	Diplomová práce III .....	54
C9530	Strukturní biochemie .....	54
C9550	Strukturní chemie I .....	55
C9551	Strukturní chemie II .....	56
C9920	Úvod do kvantové chemie .....	56
C9930	Metody kvantové chemie .....	57
F5030	Základy kvantové mechaniky .....	58
G8601	RTG-prášková difraktoetrie .....	59
JA002	Pokročilá odborná angličtina - zkouška .....	60

<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>Strukturní chemie – prodloužení akreditace</b>		Ano	1407T020
<b>Obory v jiných dokumentech</b>	Analytická chemie		Ano	1403T001
	Anorganická chemie		Ano	1401T002
	Fyzikální chemie		Ano	1404T001
	Chemie životního prostředí		Ano	2805T003
	Materiálová chemie		Ano	1407T007
	Organická chemie		Ano	1402T001
	Učitelství chemie pro střední školy		Ano	7504T075
<b>Adresa www stránky</b>	<a href="http://www.sci.muni.cz/akreditace2011">http://www.sci.muni.cz/akreditace2011</a>	<b>jmeno 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: Strukturní 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	Strukturní chemie		
Údaje o garantovi studijního oboru	<a href="#">prof. RNDr. Radek Marek Ph.D.</a>		
Zaměření na přípravu k výkonu regulovaného povolání	ne		
<b>Charakteristika studijního oboru (studijního programu)</b>			
<p>Třírozměrná struktura molekul, topologie elektronové hustoty a mezimolekulární interakce jsou klíčem určujícím chemické a fyzikální vlastnosti anorganických, organických a přírodních látek a biologickou aktivitu léčiv. Znalost supramolekulárních komplexů a dynamiky systémů je nezbytnou podmínkou pro pochopení biologické aktivity sloučenin stejně jako pochopení funkce nových materiálů.</p> <p>Cílem studia je připravit kvalitní absolventy, kteří mají dobré znalosti pokročilých strukturních metod, kterými jsou především nukleární magnetická rezonance a rentgenová difrakce v kombinaci s molekulovým modelováním a metodami kvantové mechaniky.</p>			
<b>Profil absolventa studijního oboru (studijního programu) &amp; cíle studia</b>			
<p>Znalosti absolventů jsou založeny na dobrých základech fundamentálních disciplin strukturní chemie, teoretické a fyzikální chemie, organické a anorganické chemie, spektroskopie. Studium těchto předmětů vede k pochopení struktury a chemických a fyzikálních vlastností anorganických a organických látek.</p> <p>Důraz je kladen na experimentální a teoretické metody, které poskytují informace o struktuře molekul na atomární úrovni. Topologie elektronové hustoty a mezimolekulární interakce určují fyzikální a chemické vlastnosti systémů. Metody vedoucí k jejich charakterizaci tvoří významnou část oboru Strukturní chemie. Nukleární magnetická rezonance v roztoku i v pevném stavu stejně jako rentgenová difrakce monokrystalů a práškových vzorků jsou hlavními metodami studia topologie systémů. Obě experimentální techniky jsou vhodně doplňovány a rozšiřovány teoretickými výpočty a molekulovým modelováním. Významnou součástí vzdělávání je práce s databázovými systémy a internetovými aplikacemi. Hlubší specializace je dosaženo vypracováním diplomové práce v některé z uvedených oblastí.</p> <p>Absolventi oboru Strukturní chemie jsou vybaveni teoretickými a praktickými znalostmi, které jim umožní pokračovat v dalším vzdělávání v oborech 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 strukturní analýzu léčiv, metabolitů, nanomateriálů.</p>			
<b>Charakteristika změn od předchozí akreditace (v případě prodloužení platnosti akreditace)</b>			
Drobné úpravy v nabídce povinně volitelných a doporučených předmětů.			
<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>	Strukturní 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 Strukturní chemie a dvou dalších předmětů ze skupiny Analytická chemie, Anorganická chemie, Biochemie, Fyzikální chemie, Materiálová chemie a Organická chemie dle výběru. Zkouška z hlavního předmětu klade důraz na důkladné porozumění souvislostem a poznatkům získaným absolvováním povinných a povinně volitelných kurzů magisterského studia, přihlédnuto je ke specializaci kandidáta, dané zaměřením jeho diplomové práce. Rámcové okruhy témat ke státní závěrečné zkoušce jsou uvedeny níže. Součástí státní závěrečné zkoušky je též obhajoba diplomové práce, při níž má uchazeč prokázat schopnost prezentovat získané výsledky a orientovat se v problematice specializované oblasti i širší disciplíny na současné odborné úrovni. Obhajoba diplomové práce má formu ústní prezentace, během níž uchazeč seznámí komisi a posluchače s tématem a cíli práce, řešenými problémy, použitými metodami a získanými výsledky. Odpovídá na připomínky a dotazy obsažené v posudcích vedoucího a oponenta práce a reaguje na dotazy vznesené v průběhu diskuse.</p>					
<b>Okruhy otázek – povinný předmět:</b>					
<u>Strukturní chemie</u>					
<i>Elektronová struktura</i>					
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Principy molekulové spektroskopie.</li> <li>2. Kvantově mechanické základy molekulové spektroskopie.</li> <li>3. Rotační spektra.</li> <li>4. Vibrační spektra.</li> <li>5. Elektronová, fotoelektronová a rentgenfluorescenční spektra.</li> <li>6. Základní principy magnetické rezonance, analýza izotropních spekter.</li> <li>7. G-faktory organických radikálů, izotropní hyperjemný štěpící parametr.</li> </ol>					
<i>Magnetická rezonance</i>					
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Princip jaderné magnetické rezonance.</li> <li>2. Interakce jaderného spinu.</li> <li>3. Vektorový model NMR experimentu, chemický posun, interakční konstanta.</li> <li>4. Nukleární Overhauserův jev, přenos polarizace.</li> <li>5. Dvojdímenzionální NMR spektroskopie.</li> <li>6. NMR spektroskopie v pevném stavu.</li> </ol>					
<i>Difrakční metody</i>					
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Vnitřní uspořádání krystalů.</li> <li>2. Interakce RTG záření s krystalem.</li> <li>3. Měření a zpracování difrakčních dat.</li> <li>4. Strukturní faktor, řešení a upřesňování struktur.</li> </ol>					
<i>Molekulové modelování a metody výpočtu elektronové struktury</i>					
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Molekulové modelování, popis geometrie, výpočet energie, hyperplocha potenciální energie a energetické bariéry.</li> <li>2. Molekulová mechanika a dynamika, silová pole, popis intermolekulárních interakcí, konformační analýza, docking.</li> <li>3. Metody kvantové chemie, přehled metod (semiempirické, ab initio, DFT), studium chemické reaktivity.</li> </ol>					
<b>Literatura:</b>					
<ul style="list-style-type: none"> <li>• G.-D. Zhou: <i>Fundamentals of Structural Chemistry</i>, World Scientific, 1993, ISBN 981-02-1335-2.</li> <li>• G. R. Desiraju, T. Steiner: <i>The Weak Hydrogen Bonding in Structural Chemistry and Biology</i>, Oxford University Press, Oxford 2001.</li> <li>• M. Nishio, M. Hirota, Y. Umezawa: <i>The CH/π Interaction: Evidence, Nature, and Consequences</i>,</li> </ul>					

Wiley-VCH, New York, 1998.

- N. Levine: *Molecular Spectroscopy*, John Wiley & Sons, Chichester 1975.
- J. M. Hollas: *Modern Spectroscopy*, John Wiley & Sons, Chichester 2009.
- M. H. Levitt: *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, John Wiley & Sons, Chichester 2001.
- J. Keeler: *Understanding NMR Spectroscopy*, John Wiley & Sons, Chichester 2005.
- V. Valvoda, *Základy strukturní analýzy*, Karolinum, 1992.
- C. Giacovazzo, *Fundamentals of Crystallography*, Oxford University Press, 2002.
- W. Massa, *Crystal Structure Determination*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- J. P. Glusker, K. N. Trueblood, *Crystal Structure Analysis: A Primer*, Oxford University Press, 2010.
- L. Skála: *Kvantová teorie molekul*, 1st ed. Karolinum: Praha, 1994.
- Leach: *Molecular modelling: principles and applications*, 2nd ed. Prentice Hall: Harlow England; New York, 2001.
- Christopher J. Cramer: *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, 2nd ed. John Wiley & Sons, Chichester 2004.
- D. B. Boyd: *Reviews in Computational Chemistry*, 2nd ed. Wiley-VCH, 2008.
- E. G. Lewars: *Computational Chemistry*, Springer Netherlands: Dordrecht, 2011.

### 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.

### *Separáčnı metody*

Přehled: srážení, elektrodepozice, destilace, dialýza, extrakce, chromatografie, elektromigrační metody, frakcionace v toku. Kolonové a planární separáčnı 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 separáčnıch 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, reverznı 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. et al.: *Fundamentals of analytical chemistry*. 8th ed. Brooks/Cole 2004.
- Harris D. C.: *Quantitative chemical analysis*. 4th ed. New York : W.H. Freeman, 1995.
- Volka K.: *Analytická chemie II*. VSCHT Praha 1995.
- Zýka J. a kol. : *Analytická příručka*. Díl I a II. SNTL Praha, 1988.

### Anorganická chemie

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### **Literatura:**

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

- Citron F.A., Murillo C., Wilkinson G., Bochmann M., Grimes R., *Advanced Inorganic Chemistry*, Wiley-Interscience, New York 1999, ISBN 0-471-19957-5..

## Biochemie

Aminokyseliny, jejich vzorce, acidobazické rovnováhy, izoelektrický bod,

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

Biochemie hemoglobinu,

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

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

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

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

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

## **Literatura:**

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

## 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. Kapalné 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*

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

### *II. Pohyb*

#### *Kinetická teorie ideálního plynu*

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

#### *Základy nerovnovážné termodynamiky*

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

Nelineární nerovnovážná termodynamika. Oscilující reakce.

#### *Transport iontů a kinetika přenosu elektronu*

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

#### *Chemická dynamika*

Rychlost chemických reakcí Rychlostní zákon, rychlostní konstanta a řady reakcí. Poločasy reakcí. Molekularita. Zvratné, následné a paralelní reakce. Teplotní závislost reakční rychlosti. Řetězová reakce, fotochemické reakce, katalýza a autokatalýza. Srážková teorie. Teorie aktivovaného komplexu, reakční koordináta, přechodový stav, aktivací 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 dvojrůzstva. Příprava a vlastnosti koloidů. Koagulace koloidů. Fyzikální a chemická adsorpce. Adsorpční isotermy.

### *III. Struktura*

#### *Základní pojmy kvantové mechaniky*

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

#### *Elektronová struktura atomů*

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

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

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

Jednoelektronové přiblížení, teorie molekulových orbitalů (MO), MO jako lineární kombinace atomových orbitalů (LCAO), Slaterova a Gausova funkce. Vazebné, nevazebné a antivazebné orbitály, význam hraničních orbitalů, interakce orbitalů. Variační princip, poruchový počet, repulze elektronů, repulzní integrál, Hartreeova-Fockova teorie SCF. Roothanovy rovnice. p-elektronové přiblížení. Hückelova (HMO) a rozšířená Hückelova

metoda (EHT). Mullikenova populační analýza. Zavedení spinu do vlnové funkce, spinorbitaly, 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

#### Materiálová chemie

##### *Struktura materiálů:*

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

##### *Vlastnosti materiálů:*

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

##### *Charakterizace materiálů:*

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

##### *Příprava materiálů:*

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

##### *Příprava materiálů v požadovaném tvaru:*

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

#### **Literatura:**

- Müller, Ulrich. *Inorganic Structural Chemistry*. 2. vyd. : John Wiley & Sons, 1993.
- Lalena, John N. *Inorganic Materials Synthesis and Fabrication*. Wiley-Interscience, 2008.
- Dann, Sandra E. *Reactions and Characterization of Solids*. RSC, Cambridge, 2000.
- Callister, William D., Jr. *Materials Science and Engineering, An Introduction*. 7. vyd. : John Wiley and Sons, 2007.
- Schubert, Ulrich - Hüsing, Nicola. *Synthesis of Inorganic Materials*. Weinheim : Wiley-VCH, 2000.
- Smart, Lesley - Moore, Elaine. *Solid State Chemistry : An Introduction*. 2. vyd. : CRC Press, 2005.
- West, Anthony R. *Basic Solid State Chemistry*. Second Edition. Chichester : John Wiley & Sons, 1999.

- White, Mary Anne. *Properties of Materials*. Oxford University Press, NY, 1999.
- Lalena, John N. - Cleary, David A. *Principles of Inorganic Materials Design*. John Wiley and Sons, 2010.
- Weller, Mark. *Inorganic Materials Chemistry*. Oxford, UK : Oxford University Press, 1994.

### 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 přesmyky.

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

Aromatický stav a jeho demonstrace (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 strukturní typy, rozdělení z hlediska reaktivity, vysvětlit. Mechanismus nukleofilních substitucí SN1 a SN2 a stereochemický důsledek průběhu. Eliminační reakce jako konkurenční reakce, jejich průběh a stereochemie, podmínky preference substituce versus eliminace. Hydroxysloučeniny-alkoholy a fenoly. Reaktivita hydroxylové skupiny, kyselost a vliv uhlíkatého zbytku na míru kyselosti.

Chinony, struktura a chemické vlastnosti. Etery struktura a chemické názvosloví. Fyzikální vlastnosti ve srovnání s alkoholy. Typické chemické vlastnosti, štěpení vazby C-O, tvorba peroxidických sloučenin. Epoxidy a cyklické ethery, jejich chemické vlastnosti. Crown ethery a jejich použití.

Thioly a sulfidy. Srovnání s kyslíkatými analogy. Produkty oxidace sulfinové a sulfonové kyseliny a sulfoxidy a sulfony. Sulfonové kyseliny a jejich funkční deriváty (sulfochloridy, estery sulfon. kyselin, sulfonamidy). Estery minerálních látek (sulfáty, nitráty, nitrity, fosfáty).

Aminosloučeniny, typy, názvosloví. Základní chem. vlastnosti. Diazotace a využití diazoniových solí. Aminoxidy a jejich využití. Enaminy. Kvarterní amoniové soli, Hoffmanova eliminace. Diazolátky. Diazolkany, diazoestery, diazoketony jejich příprava a reaktivita. Nitrosoučeniny, struktura a chem. názvosloví. Vliv nitroskupiny na uhlíkatý zbytek. Příprava nitrolátek (ambidentní ionty). Redukce nitrosoučenin v závislosti na pH. Azosoučeniny, azoxysoučeniny a hydrazolátky. Nitrily a isokyanidy, struktura a příprava. Hydrolyza nitrilů, sonitrilová zkouška. Organokovové sloučeniny, chem. názvosloví. Vliv kovu na chemické vlastnosti sloučeniny. Základní představitelé organokovových sloučenin a jejich reaktivita a využití v organické syntéze.

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

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

Karboxylové kyseliny, jejich struktura a chemické vlastnosti. Vliv uhlíkatého zbytku a substituce na kyselost. Esterifikace. Funkční deriváty karboxylových kyselin (estery, halogenidy, anhydridy, amidy), jejich příprava a srovnání jejich vlastností a z toho vycházející využití v organické syntéze. Tučky a jejich struktura, zmydlení. Substituční deriváty karboxylových kyselin (hydroxykyseliny-laktony, laktidy, aminokyseliny aktamy, halogenkyseliny, ketokyseliny). Deriváty kyseliny uhlíčitě, jejich klasifikace a základní typy, jejich reaktivita.

Steroidy. Struktura steroidů, napojení kruhů, číslování, řady steroidů. Steroly (struktura cholesterolu), žlučové kyseliny, steroidní hormony (mužské, ženské-estrogeny a gestageny, zásadní rozdíly ve struktuře a v účincích), kardiostimulační 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, pteridiny (báze nukleových kyselin), pyridazin struktura. Puriny (základní představitelé, báze nukleových kyselin). Pteriny (struktura).

#### Literatura:

- Mc Murry J. *Organická chemie*, překlad 6. vydání, VUTium Brno a VŠCHT Praha, 2007.
- J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers: *Organic Chemistry*, Oxford University Press, New York 2001.
- E.L. Eliel, S.H. Wilen: *Stereochemistry of Organic Compounds*, John Wiley & Sons, Inc., New York 1994.
- E.L. Eliel: *A Practical Introduction to Stereochemistry*, John Wiley & Sons, Inc., New York 2001.
- G.T.W. Solomons: *Organic chemistry*, 6th ed. New York : John Wiley & Sons, Inc., 1996. P. Hrnčiar: *Organická chémia*, 3. vyd. Bratislava : SPN, 1990.
- O. Červinka: *Chemie organických sloučenin*. Díl 1. + 2., 1. vyd., Státní nakladatelství technické literatury, 1985 a 1987.
- M. Potáček, C. Mazal, S. Janků: *Řešené příklady z organické chemie*. 1. vyd. Brno, Masarykova univerzita v Brně, 2004.
- M. Potáček: *Organická chemie pro biology*. 1. vyd. Brno : Vydavatelství Masarykovy univerzity, 1995.
- F.A. Carey, R.J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry*, Part B. New York : Plenum Press, 1990.
- Fleming: *Hraniční orbitály a reakce v organické chemii*. SNTL, Praha 1983.
- O. Exner: *Korelační vztahy v organické chemii*. SNTL, Praha 1981.
- O. Exner: *Struktura a fyzikální vlastnosti organických sloučenin*. SNTL, Praha 1985.

#### Požadavky na přijímací řízení

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

#### Doporučená literatura pro přípravu k přijímací zkoušce:

- Klikorka J., Hájek B., Votinský J. *Obecná a anorganická chemie*, 2. vyd. Praha : SNTL, 1989.
- Atkins, P. W. *Fyzikální 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 písemná zadání diplomových prací registruje a archivuje. Student může kterémukoli učiteli těchto pracovišť navrhnout téma své diplomové práce nebo se na tomto tématu dohodnout. V tomto případě navrhuje učitel téma diplomové práce pro konkrétního studenta. Omezením výběru ze zveřejněných témat diplomových prací mohou být jen předem uvedené kapacitní důvody pracoviště, na němž má být diplomová práce zpracována, nebo dřívější obsazení tématu jiným studentem.

Příklady obhájených prací:

Výpočet a vizualizace magnetického stínění - [http://is.muni.cz/th/211408/prif\\_m/](http://is.muni.cz/th/211408/prif_m/)

Teoretické studium CH- $\pi$  interakcí mezi sacharidy a aromatickými systémy - [http://is.muni.cz/th/211486/prif\\_m/](http://is.muni.cz/th/211486/prif_m/)

*Další obhájené práce nejsou k dispozici z důvodu omezeného počtu studentů přijímaných do studijního oboru.*

V současnosti řešená témata:

Studium krystalových forem farmaceutických substancí pomocí NMR spektroskopie pevného stavu

Výpočetní studie struktury a dynamiky supramolekulárních komplexů založených na glykolurilových jednotkách

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 nebo Biochemie na PřF MU, případně na jiných VŠ v ČR i v zahraničí.



## C1- Doporučený studijní plán

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

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

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

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

## 1. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
<b>Podzimní semestr</b>					
Povinné předměty					
<a href="#">C7000</a>	Oborový seminář I	2	0/2	z	<a href="#">Černík, Holoubek</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="#">C9550</a>	Strukturní chemie I	2+2	2/0	zk	<a href="#">Munzarová, Marek</a>
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	12			
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	9			
<b>Jarní semestr</b>					
Povinné předměty					
<a href="#">C6950</a>	Chemická exkurze	0	0/0	z	<a href="#">Janků</a>
<a href="#">C6960</a>	Odborná praxe	0	3 týdny	z	
<a href="#">C8000</a>	Oborový seminář II	2	0/2	z	<a href="#">Černík, Holoubek</a>
<a href="#">C8001</a>	Diplomová práce II	5	0/0/5	kz	vedoucí práce
<a href="#">C9551</a>	Strukturní chemie II	2+2	2/0/0	zk	<a href="#">Marek, Nečas, Kříž</a>
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	10			
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	9			

## 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,Holoubek</a>
<a href="#">C9001</a>	Diplomová práce III	12	0/0/12	kz	vedoucí práce
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	6			
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	10			
<b>Jarní semestr</b>					
Povinné předměty					
<a href="#">CA000</a>	Oborový seminář IV	2	0/2	z	<a href="#">Černík,Holoubek</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="#">CB070</a>	Proteinová krystalografie	1+2	1/0	zk	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">CB080</a>	Proteinová krystalografie - seminář	1	0/1	z	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">C2110</a>	Operační systém UNIX a základy programování	2+1	0/2	k	<a href="#">Kulhánek</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="#">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="#">C7999</a>	Advanced Methods of NMR Spectroscopy	2+1	0/0/2	zk	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">C8951</a>	NMR spektroskopie pevného stavu - základní principy a aplikace v chemii.	1+2	1/0	zk	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">C9920</a>	Úvod do kvantové chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Munzarová</a>
<a href="#">F5030</a>	Základy kvantové mechaniky	4+2	2/2	zk	<a href="#">Munzar</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="#">C2150</a>	Zpracování informací a vizualizace v chemii	2+1	0/2	k	<a href="#">Kříž, Prokop</a>
<a href="#">C6310</a>	Symetrie molekul	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kubáček</a>
<a href="#">C8800</a>	Rtg strukturní analýza	2+2	2/0	zk	<a href="#">Marek</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="#">C8862</a>	Výpočty volných energií - cvičení	1	/1	z	<a href="#">Kulhánek</a>
<a href="#">C8863</a>	Výpočty volných energií	2+1	2	zk	<a href="#">Kulhánek</a>
<a href="#">C8950</a>	NMR - Strukturní analýza	2+2	2/0	zk	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">C8953</a>	NMR - Strukturní analýza - seminář	1	0/1	z	<a href="#">Marek</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="#">C5060</a>	Metody chemického výzkumu	2+2	2/0	zk	<a href="#">Táborský, Bittová, Preisler</a>
<a href="#">C5300</a>	Statistická termodynamika	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šob, Vřešťál</a>
<a href="#">C5320</a>	Fyzikálně chemické základy NMR	3+2	2/1	zk	<a href="#">Sklenář, Fiala</a>
<a href="#">C5440</a>	Separční metody	1+2	1/0	zk	<a href="#">Mazal</a>
<a href="#">C5500</a>	Stereochemistry of Organic Compounds	2+2	2/0	zk	<a href="#">Mazal</a>
<a href="#">C5860</a>	Aplikovaná NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Brož</a>
<a href="#">C7031</a>	Atomová spektrometrie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kanický, Otruba</a>
<a href="#">C7410</a>	Struktura a reaktivita	2+2	2/0	zk	<a href="#">Klán</a>
<a href="#">C7415</a>	Struktura a reaktivita - seminář	1	0/1	z	<a href="#">Klán</a>
<a href="#">C7460</a>	Identifikace organických látek - cvičení	1	0/1	z	<a href="#">Pazdera</a>
<a href="#">C9530</a>	Strukturní biochemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Židek</a>
<b>Jarní semestr</b>					
Doporučené volitelné předměty					
<a href="#">C6290</a>	Atomová absorpční spektrometrie	1+2	1/0	zk	<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="#">C6800</a>	Multinukleární NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Pinkas</a>
<a href="#">C7041</a>	Molekulová spektrometrie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kanický, Táborský</a>
<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="#">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>

<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. Ivan Holoubek CSc.](#)

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

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

**Osnova:**

- Příspěvky studentů, vyučujících a externistů.

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

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

**Literatura:**

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

### CA001 Diplomová práce IV

**Vyučující:** vedoucí práce

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

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

**Osnova:**

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

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

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

**Literatura:**

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

### CB070 Proteinová krystalografie

**Vyučující:** [doc. RNDr. Jaromír Marek 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 principy monokrystalové rtg. strukturní analýzy. Kromě teorie monokrystalové difrakce se zde věnujeme i přístroj. výbavě používané při difrakčním experimentu a metodám používaným při vyhodnocování experimentálních dat. Na předmět CB070 navazuje cvičení CB080.

**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, CNS a CCP4
- Příprava proteinových krystalů
- Proteiny a metody kovových derivátů
- Molekulární nahrazení
- Upřesňování proteinových strukturních modelů
- Krystalografické databáze

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

**Metody hodnocení:** Zkouška - ústní. Domácí práce prováděná na počítači.

**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

### CB080 Proteinová krystalografie - seminář

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

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

**Cíle předmětu:** Praktické cvičení k přednášce CB070. Na konci tohoto kurzu bude student samostatně zvládnout zpracování synchrotronových difrakčních dat a práci s krystalografickými databázemi, a pochopí i principy práce se systémem CCP4 a mapami elektronové hustoty.

**Osnova:**

- Zdroje a detektory rtg. záření, Difraktometry, plošné detektory
- Program XDS
- Systém CCP4
- Fázový problém, Molekulární nahrazení
- Programy pro MR
- R-faktory, metoda nejmenších čtverců.
- Programy SHELXS a SHELXL, CNS
- Upřesňování proteinových strukturních modelů, mapa elektronové hustoty
- Program Coot
- Krystalografické databáze

**Výukové metody:** Praktické procvičování činností odpovídající teoretickému kursu CB 070. Během semestru je vyžadována domácí práce na počítači.

**Metody hodnocení:** Zápočet - ústní. Domácí práce na počítači.

**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

### C2110 Operační systém UNIX a základy programování

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

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

**Cíle předmětu:** Předmět nabízí alternativu k široce rozšířenému prostředí MS Windows. Studenti jsou vedeni k hlubšímu pochopení funkcí programů, které používají, k tvorbě vlastních jednoduchých aplikací. Získané znalosti jsou nezbytným předpokladem pro počítačovou chemii a molekulové modelování a pro případné navazující studium programování v kompilovaných jazycích (C/C++).

**Osnova:**

1. Klastř WOLF (struktura, pravidla používání, správci)
2. Přihlašování (místní a vzdálené přihlášení, export displeje, změna hesla)
3. Programové vybavení (systémové aplikace, vědeckotechnické aplikace)
4. Textové editory (vi, grafické textové editory)

- 5. Příkazová řádka (terminály, struktura, historie a automatické dokončování)
- 6. Souborový systém (struktura, absolutní a relativní cesty, práva, speciální soubory, diskové oddíly)
- 7. Příkazy (manuálové stránky, přehled příkazů)
- 8. Procesy (procesy, standardní vstup a výstup, přesměrování, roury)
- 9. Úvod do skriptování (co je to skriptování, výhody a nevýhody, spouštění skriptů)
- 10. Skriptování v jazyce Bash (proměnné, základní řídicí konstrukce)
- 11. Skriptování v programu GNUPlot (vykreslování 2D a 3D grafů, interaktivní versus neinteraktivní mód)
- 12. Skriptování v jazyce AWK (základní konstrukce, jednoduché zpracovávání textových souborů)
- 13. Použití skriptování při analýze dat (znázornění průběhu výpočtu Gibbsových energií, studentské projekty)

**Výukové metody:** procvičování praktických příkladů, diskuze

**Metody hodnocení:** Kurz probíhá formou cvičení v počítačové učebně - část je věnována přednášce a část praktickému zkoušení práce s UNIXem a skriptování. Účast je povinná (povolené jsou dvě dopředu omluvené absence). V průběhu semestru se uskuteční dva testy (2x 10 bodů). Ve zkouškovém období pak závěrečný test (50 bodů) a samostatné sestavení skriptu (30 bodů). Pro úspěšné zakončení předmětu je zapotřebí získat minimálně 80 bodů.

**Literatura:**

- Hahn, Harley - Norton, Peter. *Průvodce UNIXEM od Petera Nortona : Jak komunikovat s UNIXEM, jak UNIX ukládá a zobrazuje informace, používání unixového systému souborů, práce s editorem vi : Peter Norton's Guide to UNIX (Orig.)*. 1.vyd. Brno : UNIS, 1993. XXIV, 562. info
- Brandejs, Michal. *UNIX - LINUX :praktický průvodce*. 1. vyd. Praha : Grada, 1996. 340 s. ISBN 80-7169-170-4. info
- Petrлік, Lukáš. *Jemný úvod do systému UNIX*. 1. vyd. České Budějovice : Kopp, 1995. 189 s. ISBN 80-85828-28-6. info

## C2150 Zpracování informací a vizualizace v chemii

**Vyučující:** [Mgr. Zdeněk Kříž Ph.D.](#), [Mgr. Martin Prokop Ph.D.](#)

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

**Cíle předmětu:** Kurs je určen všem, kteří chtějí získat základní přehled o vizualizacích v molekulovém modelování. Student je postupně seznamován s postupy získání dat z databáze, jejich validací, přípravou pro počítačové simulace až po vizualizaci výsledků a tvorbu grafických výstupů ve formě prezentací nebo posterů. Cílem kursu není seznámení s jednotlivými metodami počítačové chemie.

**Osnova:**

- 1.Zobrazení molekul, převod 2D zobrazení do 3D a naopak. 2.Přehled programů pro vizualizaci molekul. 3.Strukturní databáze biomolekul a jejich prohledávání. 4.Validace struktur získaných z databázi a příprava dat pro molekulové modelování – program WHAT IF a jeho WWW server. 5.Vizualizace molekul pomocí programu VMD. 6.Vizualizace trajektorií molekulové dynamiky – program VMD. 7.Zpracování dat z MD a jejich vizualizace – programy gnuplot, xmgrace. 8.Program TRITON – možnosti vizualizace. 9.Program TRITON – aplikace v molekulovém modelování. 10. Příprava grafických prezentací – Open Office, PovRay, Render3D a tvorba stereoobrázků. 11. Tvorba animací a možnosti rozšíření programu VMD. 12. Vizualizace molekul v ostatních programech – Chimera, PyMol.

**Výukové metody:** Praktická cvičení u počítače.

**Metody hodnocení:** Praktická znalost programů VMD a Triton. Prezentace obsahující kromě textu také grafy, video ukázky a obrázky.

**Literatura:**

- *Molecular modeling of proteins*. Edited by Andreas Kukol. Totowa, N.J. : Humana Press, 2008. xi, 390 p. ISBN 978-1-58829-864. info
- Hóltje, Hans-Dieter - Folkers, Gerd. *Molecular modelling :basic principles and applications*. Edited by Thomas Beier - Wolfgang Sippl - Didier Rognan. Weinheim : VCH Verlagsgesellschaft, 1997. xii, 194 s. ISBN 3-527-29384-1. info
- *Molecular modeling of nucleic acids*. Edited by Neocles B. Leontis - John SantaLucia. Washington : American Chemical Society, 1998. x, 435 s. ISBN 0-8412-3541-4. info

- <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

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

**Osnova:**

- 1. Difrakce elektronů a rtg. záření . Elektronů 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 disperze, 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 multiplletů, 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

## C5060 Metody chemického výzkumu

**Vyučující:** [Mgr. Petr Táborský 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 disperze (ORD) a Cirkulárně dichroická spektroskopie (CD). Elektronová paramagnetická rezonance. Luminiscence.

**Osnova:**

- 1. Elektronová mikroskopie. Interakce elektronů s pevnou látkou, vlnové vlastnosti elektronu. Elektronový mikroskop (elektromagnetické čočky, elektronová tryska, vakuová soustava), tvorba obrazu a vznik kontrastu. Difrakce na monokrystalu a na polykrystalu. Příprava vzorků - leptání.
- 2. Difrakce rentgenova záření. Elementární krystalografie: symetrie struktury, prostorové grupy symetrie, difrakce rtg. záření, strukturní faktor. Základy strukturní analýzy: sběr dat, jejich redukce, fázový problém a jeho řešení, zpřesnění strukturního modelu, interpretace struktury.
- 3. Krystalografie proteinů. Makromolekulární krystalizační techniky, metoda sedící a visící kapky, očkování. Difrakční experiment: zdroje rtg. záření, detektory, kryokrystalografie. Metody řešení fázového problému u proteinů, metoda molekulárního přemístění, metody kovových derivátů (SIR,

MIR, MIRAS), MAD a selenoproteiny. Mapy elektronové hustoty, Výstavba strukturního modelu a jeho zpřesňování.

- 4. Fluorescenční spektroskopie. Fluorescence a další luminiscenční spektroskopie, doba života, kvantový výtěžek. Intenzita fluorescence, zhášení a samozhášení. Spektra excitační a emisní. Kvazičarová fluorescence a fluorescence v pevné fázi. Spektrometr a postup měření.
- 5. Techniky Ramanovy spektroskopie. Pružný a nepružný rozptyl záření (stokesova, antistokesova oblast a Rayleighova linie); výběrová pravidla – polarizovatelnost a tranzitní integrál, depolarizační faktory Ramanových čar; elektronická, rezonanční a povrchově zesílená Ramanova spektroskopie; nelineární efekty - stimulovaný RA efekt, inverzní RA efekt, hyper-RA efekt, koherentní antistokesova Ramanova spektroskopie; experimentální technika měření Ramanových spekter.
- 6. IR spektroskopické metody. Vznik pásů v IR spektrech, výběrová pravidla – dipólový moment a tranzitní integrál; normální, vyšší harmonické a kombinační vibrační přechody; experimentální technika měření IR spekter, používané materiály a rozpouštědla, příprava vzorků k měření; aplikace v kvalitativní, strukturní a kvantitativní analýze, studium vazebných poměrů (řády a pevnost vazeb).
- 7. Blízkoinfračervená spektroskopie. NIR spektroskopie jako metoda bez úpravy vzorku, nízká citlivost, nízké rozlišení. Matematické metody pro kvantitativní a kvalitativní analýzu. Provozní analytika - přenos signálu skleněnými vlákny, kontrola stejnosti produktu při automatické výrobě.
- 8. Cirkulárně dichroická spektroskopie. Absorpce záření u monomerů a polymerů; absorpce u nukleových kyselin. Výhody a nevýhody metody. Vibrační cirkulární dichroismus a lineární dichroismus.
- 9. Moderní elektrochemické metody, jejich charakterizace a aplikace. 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. Distribuční funkce v jednoatomových kapalinách. Radiální korelační funkce. 11. Statistická termodynamika krystalu. Einsteinův a Debyeův model. Charakteristické teploty. Fonony. 12. Vibrační a konfigurační entropie. Model regulárního roztoku. Mřížková teorie roztoků polymerů (Flory-Huggins). Adsorpce. 13. Fluktuační částic a termodynamických veličin. Statistika výskytu fluktuační 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 součinný operátorový formalismus jsou použity pro základní popis experimentů NMR ve více dimenzích. Získané vědomosti umožňují základní orientaci v moderních metodách NMR spektroskopie využívaných v organické a anorganické chemii, biochemii a metodách moderní strukturní biologie a biofyziky.

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** Přednášky a cvičení

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška

**Literatura:**

- *Understanding NMR spectroscopy*. Edited by James Keeler. Chichester : Wiley, 2005. xv, 459 p. ISBN 9780470017876. info

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

## C5440 Separční metody

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Chromatografické metody. Úvod, základní teorie a pojmy. Klasifikace chromatografických systémů a postupů. Základní teoretické modely popisující chromatografii. Retenční rovnice, teoretické patro, faktory ovlivňující separační účinnost, eluční poměr a rozlišení.
- 2. Plynová chromatografie. Základní pojmy. Van Deemterova rovnice. Technika GC. Blokové schéma plynového chromatografu. Nosný plyn, techniky dávkování vzorku, náplňové a kapilární chromatografické kolony, stacionární fáze, enantioselektivní kolony.
- 3. Plynová chromatografie. Hlavní metody detekce používané v GC. Plamenově ionizační detektor (FID), tepelně vodivostní detekce (TCD), elektronový záchyt (ECD), spojení GC s hmotnostní spektrometrem (GC-MS).
- 4. Plynová chromatografie. Kvalitativní analýza, identifikace z elučních údajů, eluční závislosti (Kovatsovy indexy), selektivní detektory. Kvantitativní analýza, faktory ovlivňující přesnost kvantitativní analýzy, metody kalibrace.
- 5. Kapalinová chromatografie. Základní pojmy. Chromatografie na sloupci, flash chromatografie - základy techniky, příprava kolon, detekce, stacionární fáze. Planární chromatografie. Papirová chromatografie, tenkovrstvá chromatografie.
- 6. Vysokoučinná kapalinová chromatografie (HPLC). Blokové schéma HPLC. Mobilní fáze, čerpadla, odplynění, gradient mobilní fáze. Dávkování vzorku. Kolony pro HPLC, stacionární fáze, výběr kolony, enantioselektivní fáze. Detektory pro HPLC, UV-VIS a fluorescenční detektor, refraktometr, ELSD, polarimetrická detekce.
- 7. Iontová, gelová a afinitní chromatografie. Klasifikace ionexů a jejich vlastnosti - selektivita ionexů. Rovnováhy při výměně iontů. Chelatační sorbenty. Vylučovací kapalinová chromatografie (GPC, SEC), retence v SEC, stacionární fáze - anorganické a organické gely. Biospecifická afinitní chromatografie - retence, bioafinitní sorbenty a podmínky chromatografie.
- 8. Příprava vzorku pro chromatografickou analýzu. Problém získání reprezentativního vzorku. Isolační a koncentrační techniky. Derivatizační metody v GC a HPLC.
- 9. Extrakční metody. Rovnováhy mezi dvěma kapalnými fázemi. Extrakce a roztrpávání. Superkritická extrakce. Voolba a vlastnosti superkritických mobilních fází. Příklady aplikací.



- 10. Destilace. Obecné principy. Prostá destilace. 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.

## C5500 Stereochemistry of Organic Compounds

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

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

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

**Osnova:**

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

stereoselektivní syntézy. Strategie řízení stereochemie v diastereoselektivní a enantioselektivní syntéze. Využití chirálních neracemických reagentů a katalyzátorů. 12. Chiroptické vlastnosti. Optická aktivita. Anisotropní refrakce, Optická rotační disperse (ORD). Anisotropní absorpce, Cirkulární dichroismus (CD). Využití CD a ORD při určování konfigurace a konformace. Polarimetrie, empirická pravidla a korelace. 13. Chiralita molekul bez center chiralit. Nomenklatura. Alleny, spirany, atropoisomerie způsobená zábranou rotace kolem jednoduché vazby. Heliceny. Planární chiralita (Cyklofány, anuleny, metalloceny a d.). Kryptostereoisomerie.

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** Zkouška s písemnou a ústní částí.

**Literatura:**

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

### C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Correlation of chemical shifts Components of screening constant, dependence of delta on electronegativity, on sigma's. Diamagnetic anisotropy, solvent shift, "edge-to face" and "face-to-face" interaction. Calculation of NMR spectra from increments and from electron densities. 2.Lanthanide shift reagents <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 dipyritydyl-LSR. 1:1 and 1:2 complexes - equilibrium constants. Complexation of LSR and salts of Ag, mixed shift reagent. LSR and quaternal salts. 3.Coupling constants Energetic levels for AX systém ( J=0, J>0 and J

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

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška buď v angličtině nebo češtině.

**Literatura:**

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

## C6310 Symetrie molekul

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

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příř 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 aplikace v teorii chemické vazby. Cílem předmětu je seznámit s východisky rozboru chemického problému z pohledu symetrie a tento rozbor procvičit.

**Osnova:**

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

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

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

**Literatura:**

- Atkins, P. W. - Paula, Julio de. *Atkins' physical chemistry*. 8th ed. Oxford : Oxford University Press, 2006. xxx, 1064. ISBN 0-19-870072-5. info

- Cotton, Frank Albert. *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd Edition, John Wiley & Sons; ISBN: 0471510947
- Hargittai, István - Hargittai, Magdolna. *Symmetry through the eyes of a chemist*. 2nd ed. New York : Plenum Press, 1995. xii, 496 s. ISBN 0-306-44852-1. info

## C6320 Chemická kinetika

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

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

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

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** Přednášky.

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

**Literatura:**

- Treindl, 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 temátům 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

## C6790 Hmotnostní spektrometrie

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

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

**Cíle předmětu:** Obsahem kursu jsou následující témata: Principy a vývoj hmotnostní spektrometrie. Metody ionisace a desorpce: Ionisace elektrony, metody chemické ionisace, ionisace polem a desorpce polem. Ionisace laserem, MALDI. Ionisace bombardováním rychlými atomy a ionty. Principy separace iontů; v hmotnostní spektrometrii: Sektorové hmotnostní spektrometry, detekce metastabilních iontů; dynamické hmotnostní spektrometry. Spojení chromatografických metod s hmotnostní 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 knihovnách spekter. Cílem kurzu je poskytnout posluchačům základní informace o hmotnostní spektrometrii, které jim umožní orientaci při použití metody v praxi.

**Osnova:**

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

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

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

**Literatura:**

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

## C6800 Multinukleární NMR spektroskopie

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

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

**Cíle předmětu:** V přednášce jsou diskutovány základní měřitelné veličiny NMR spekter, jako stínící konstanty a chemické posuny, skalární interakční konstanty a relaxační časy. Dále jsou zdůrazněny vlivy chemických a

fyzikálních faktorů, strukturálních 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 strukturálních poměrech v molekule. Posoudit jaderné, elektronické a strukturální vlivy na relaxační rychlosti jader. Posoudit vliv chemických a fyzikálních faktorů a strukturálních 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

### 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:**

**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. Ivan Holoubek CSc.](#)

**Rozsah:** 0/2/0. 2 kr. Ukončení: z.

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

**Osnova:**

- Příspěvky studentů, vyučujících a externistů.

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

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

**Literatura:**

- *Journal of the American Chemical Society*. 2009. ISSN 0002-7863. info

- Current journals specified by the lecturers
- Odborná literatura dle zaměření semináře
- *Angewandte Chemie International Edition*. 2009. ISSN 1433-7851. info

## C7001 Diplomová práce I

**Vyučující:** vedoucí práce

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

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

**Osnova:**

- Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

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

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

**Literatura:**

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

## C7031 Atomová spektrometrie

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Elektromagnetické záření, elektromagnetická vlna, rychlost ve vakuu, Poyntigův vektor, Planckův vyzářovací 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 vyzářování, 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 vyzářovacím 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. Neselektrální interference. 6. Optická emisní spektrometrie UV-VIS (OES). Přehled metodik OES. Tepelná, elektronová a zářivá excitace molekul, atomů a iontů. Boltzmannův zákon. Ionizace a Sahova rovnice. Excitační zdroje v OES. Teoretické základy emise a absorpce záření, Kirchhoffův zákon. Průběh závislosti emise záření na koncentraci analytu. 7. Plamenová emisní spektrometrie molekul a atomů (FES). Molekulová a atomová spektra. Instrumentace v FES: plameny, transport vzorku, separace a detekce záření. Spektrální a nesepektrální interference. Analytické vlastnosti FES. 8. Oblouková a jiskrová OES, klasická varianta emisní spektrografie. Jiskrové a obloukové generátory, charakter obloukového a jiskrového spektra. Spektrografie 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



mechanizmy v argonovém plazmatu ICP. Spektrální vlastnosti ICP z analytického hlediska, kalibrační závislosti, rozsah, linearita, Meze detekce. Spektrální interference a další rušivé vlivy v ICP OES. Hmotnostní ICP spektrometry. 10. Výboje za sníženého tlaku v OES. Izotermní a neizotermní plazma. Geisslerovy trubice a analýza plynů. Výboj v duté katodě, aplikace ve stopové a izotopové analýze. Grimmův výboj, spektrální vlastnosti a konstrukční uspořádání. Analýza povrchových vrstev a aplikace v technické praxi. Hmotnostní spektrometry s neizotermním plazmatem. 11. Atomová fluorescenční spektrometrie. Princip metody, analytické parametry (citlivost, meze detekce, koncentrační rozsah). 12. Elementární analýza látek rentgenovými paprsky. Vznik primárního a fluorescenčního RTG záření. Serie čar a jejich symbolika, nezářivé pochody v atomech (sekundární a Augerovy elektrony). RTG fluorescenční vlnově disperzní spektrometry simultánní a sekvenční, jejich analytické vlastnosti. Energodisperzní RTG spektrometry a aplikace. 13. Zářivé interference v RTG spektrometrii a jejich korekce. Absorpční RTG spektrometrie a její analytické aplikace. Nezářivé interference a jejich eliminace přípravou vzorku a matematickou korekcí. Praktické aplikace. 14. RTG spektrometrie s buzením záření nabitými částicemi. Elektronová mikrosonda a rastrovací elektronový mikroskop jako zdroje primárního RTG záření a jejich aplikace pro lokální mikroanalýzu. Princip a analytické využití buzení RTG záření protony a ionty.

**Výukové metody:** teoretická příprava

**Metody hodnocení:** přednáška, ústní zkouška

**Literatura:**

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

## C7041 Molekulová spektrometrie

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Klasifikace optických analytických metod, rozdělení metod molekulové spektroskopie, analytické a strukturní aspekty optických metod, interakce hmota-záření. Fotometrie, jednotky. 2. Molekulová absorpční spektroskopie v ultrafialové a viditelné oblasti: podstata a charakter spekter UV a Vis, molekulové orbitály, symbolika a členění molekulových termů, multiplicita termů, elektronické stavy molekul. 3. Typy elektronických přechodů v molekulách a jejich projevy ve spektrech, chemická teorie barevnosti (chromofory a auxochromy), tvar a vibrační struktura absorpčních pásů, Franckův-Condonův princip a vibronické přechody. 4. Elektronická spektra důležitých tříd látek: alifatické nenasycené uhlovodíky, deriváty alifatických uhlovodíků, aromatické uhlovodíky, jejich heteroanaloga a substituční deriváty, organická barviva, anorganické ionty a komplexy kovů, spektra přenosu náboje. 5. Vnitřní a vnější efekty ovlivňující elektronická spektra: sterické efekty, tautomerní rovnováhy, pH, rozpouštědla. Empirické výpočty elektronických spekter. Instrumentace UV a Vis spektroskopie. 6. Použití UV-Vis spektroskopie: určování struktury organických látek, kvalitativní analýza. Bouguer-Lambert-Beerův zákon, kvantitativní analýza. Analytické využití rozptylu: turbidimetrie, nefelometrie, difusní reflektance, titrační varianty optických metod. 7. Luminiscenční spektroskopie: podstata, klasifikace. Fluorimetrie, fosforimetrie, vztah struktura-spektrum, Instrumentace. Elektro-, bio-, termo-, chemiluminiscence, luminiscence v pevném stavu (kandoluminiscence), laserová fluorimetrie. Analytické aplikace. 8. Infračervená spektroskopie. podstata a charakter infračerveného spektra, molekulové vibrace a vznik vibračních spekter, rotační hladiny molekul a rotační spektra, rotačně-vibrační spektra, výběrová pravidla a intenzita absorpčních pásů, vibrační frekvence a vlastnosti molekul. 9. Faktory ovlivňující charakteristické vibrace: vliv skupenství a rozpouštědla, vliv vodíkové vazby, vliv hmotnosti atomů, elektrické vlivy, sterické vlivy, pnutí kruhu, konformace, vibrační

interakce. Infračervená spektra organických látek. Instrumentace a pracovní technika. 10. Ramanova spektroskopie: podstata a charakter spekter, instrumentace, pracovní technika a použití. Mikrovlnná spektroskopie. 11. Analytické aplikace infračervené a Ramanovy spektroskopie. 12. Magnetická rezonanční spektroskopie: spektroskopie nukleární magnetické rezonance, podstata NMR spekter a instrumentace, chemický posun, intenzita rezonančních signálů, štěpení signálů, spektra 1. řádu, spinové systémy, spektra vyšších řádů. Vliv chemické výměny na spektrum NMR. 13. NMR spektra jader těžších atomů. Použití NMR spektroskopie. Spektroskopie elektronové paramagnetické rezonance. 14. Analytická refraktometrie. Optická rotační disperze, cirkulární dichroismus. Mössbauerova spektroskopie. Fotoakustická spektrometrie.

**Výukové metody:** teoretická příprava

**Metody hodnocení:** Přednášky, ústní zkouška s písemnou přípravou.

**Literatura:**

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

## 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 uhlovlíků. 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 elektrofilily (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'Ferrallový-Jencksovy diagramy. Curtinův-Hammettův princip. 8. Termodynamika a kinetika jako prostředky ke studiu mechanismů chemických reakcí. Vztah pro Gibbsovu energii (LFER): Hammettova rovnice. Taftova rovnice. QSAR. Kinetické izotopové efekty. 9. Katalýza. Specifická a obecná acidobazická katalýza. Brønstedova korelace. Termodynamický cyklus. Heterogenní katalýza. Katalýza s přenosem mezi fázemi. 10. Přenos elektronu. Ionizační potenciál, elektronová afinita a charge-transfer (CT) komplexy. Marcusova teorie. Reakce ve vnitřní a vnější sféře. Přenos elektronu v SN2 a SRN1 reakcích. 11. Fotochemie. Excitace elektromagnetickým zářením. Přechody mezi elektronovými stavy. Zářivé a nezářivé procesy. Přenos energie. Studium mechanismů fotoreakcí. 12. Neklasické aktivace chemických reakcí. Spinová chemie: Efekt magnetického pole (MFE) a magnetický izotopový efekt (MIE). Mikrovlnná chemie. Sonochemie. Mechanochemie. Radiační chemie. Plazmová chemie.

**Výukové metody:** Teoretická příprava.

**Metody hodnocení:** 1 závěrečný písemný test + ústní zkouška.

**Literatura:**

*povinná literatura*

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

neurčeno

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

## C7415 Struktura a reaktivita - seminář

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Základní pojmy. Rozměr, čas, rychlost a energie v chemii. Vazba. Vnitřní parametry struktury a jejich deformace. Fyzikální vlastnosti sloučenin podmíněné polohou a dislokacemi atomových jader. Reaktivní intermediáty. Prostředky k určování struktury. 2. Stabilita molekul. Termochemické aditivní výpočty. Konformace acyklických a cyklických uhlovodíků. Vliv heteroatomu na konformační chování. Fyzikální vlastnosti sloučenin podmíněné elektronovou hustotou a jejími změnami. Torzní a stereoelektronové efekty. Hyperkonjugace. Anomerní efekt. 3. Aromaticita. Antiaromaticita. Homoaromaticita. Aromatické ionty a dipóly. 4. Nekovalentní interakce a solvatace. Chemie v plynné a kapalně fázi. Roztoky. Iontové páry. Hughesův-Ingoldův model. Vodíková vazba. -Interakce. Hydrofobní efekt. Molekulární rozpoznávání. 5. Přenos protonu. Acidobazické rovnováhy ve vodném i nevodném prostředí a v plynné fázi. Vliv substituentů na sílu Brønstedových kyselin a zásad. HSAB. 6. Chemická kinetika a reaktivita. Teorie tranzitního stavu. Hammondův a Curtinův-Hammettův princip. Aktivace a hnací síla chemických reakcí. Rychlostní konstanty. Nukleofily a elektrofilny 7. Termodynamika a kinetika jako prostředky ke zkoumání mechanismů chemických reakcí. Izotopové efekty. Efekty substituentů. Vztah pro Gibbsovu energii (LFER). Hammettova rovnice. Taftova rovnice. QSAR. Vztah mezi velikostí kruhu a rychlostními konstantami cyklizačních reakcí. 8. Katalýza. Katalýza přechodovými kovy; katalýza heterogenní a s přenosem mezi fázemi. Enzymatická katalýza. 9. Přenos elektronu. Ionizační potenciál, elektronová afinita a charge-transfer komplexy. Marcusova teorie. Reakce ve vnitřní a vnější sféře. Přenos elektronu v SN2 a SRN1 reakcích. 10. Orbitalová symetrie a reaktivita. Pericyklické reakce. Aromaticita tranzitního stavu v pericyklických reakcích. 11. Fotochemie. Excitace elektromagnetickým zářením. Přechody mezi elektronovými stavy. Zářivé a nezářivé procesy. Fotochemie v pevné fázi a na tuhých nosičích. 12. Spinová chemie. Efekt magnetického pole (MFE). Magnetický izotopový efekt (MIE). Chemicky indukovaná dynamická jaderná polarizace (CIDNP). 13. Neklasické aktivace chemických reakcí. Mikrovlnná chemie. Sonochemie. Mechano-chemie. Plazmová chemie. Interakce gama-záření s organickými látkami. Vliv skupenství.

**Výukové metody:** Cvičení k přednášce

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

**Literatura:**

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

## C7460 Identifikace organických látek - cvičení

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

**Rozsah:** 0/1/0. 1 kr. Ukončení: z.

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

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** Seminář.

**Metody hodnocení:** Seminář-cvičení

**Literatura:**

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

## **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/>

## **C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I**

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

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

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

**Osnova:**

1. Experiment versus molekulové modelování (úvod do molekulového modelování, validace a predikce, přehled experimentálních metod s jednomolekulárním rozlišením)
2. Kvantová mechanika (stručný úvod, Bornova-Oppenheimerova aproximace, koncept hyperploch potenciální energie, stručný přehled metod a programů)
3. Hyperplochy potenciální energie (význam, optimalizační metody, hledání lokálních a globálních minim a tranzitních stavů, výpočet termodynamických veličin)
4. Molekulová mechanika (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 Ph.D.](#)

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

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

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** praktické cvičení

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

**Literatura:**

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

### C7999 Advanced Methods of NMR Spectroscopy

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

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

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

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** Laboratory training and class discussion.

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

**Literatura:**

*doporučená literatura*

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

## C8000 Oborový seminář II

**Vyučující:** [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [prof. RNDr. Ivan Holoubek CSc.](#)

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

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

**Osnova:**

- Příspěvky studentů, vyučujících a externistů.

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

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

**Literatura:**

- 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)

## C8500 Mechanismy organických reakcí

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Jak správně psát reakční mechanismy. Zápis struktury a elektronových přesunů. 2. Jak studovat reakční mechanismy. Kinetické i nekinetické metody. Identifikace produktů. Křížové pokusy. Izotopické značení. Vliv rozpouštědla. Stereochemie. 3. Reaktivní intermediáty. Radikály, karbeny, nitreny, karbokationty, karbanionty. 4. Elektrofilní adice na násobnou vazbu. Hydratace. 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 benzylnového 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 benzylnového 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.

## C8800 Rtg strukturní analýza

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

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (přif 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

## 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 některými 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 vypočetní chemii.

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** Práce na projektu.

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

**Literatura:**

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

### **C8862 Výpočty volných energií - cvičení**

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

**Rozsah:** 0/1. 1 kr. Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Kurz je zaměřen na získání základních znalostí v oblasti výpočtů volných energií pomocí metod výpočetní chemie. Student si prakticky vyzkouší vybrané metody probírané na přednášce na modelových systémech.

**Osnova:**

- volné energie metodami koncových stavů
- solvatační volné energie pomocí termodynamické integrace
- volná energie konformačních přeměn pomocí metod potenciálu střední síly

**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:**

- Leach, Andrew R. *Molecular modelling : principles and applications*. 2nd ed. Harlow : Prentice Hall, 2001. xxiii, 744. ISBN 0-582-38210-6. info
- *Free energy calculations : theory and applications in chemistry a biology*. Edited by Christophe Chipot - Andrew Pohorille. Berlin : Springer, 2007. xviii, 517. ISBN 978-3-540-38447. info

- Cramer, Christopher J. *Essentials of computational chemistry :theories and models*. 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 2004. xx, 596 s. ISBN 0-470-09181-9. info

## C8863 Výpočty volných energií

**Vyučující:** [RNDr. Petr Kulhánek PhD.](#)

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

**Cíle předmětu:** Kurz je zaměřen na získání základních znalostí v oblasti výpočtů volných energií pomocí metod výpočetní chemie. Student získá přehled o dostupných metodách, jejich přednostech a nevýhodách. Nabyté znalosti by měly být dostačující k samostatné aplikaci nabytých znalostí k řešení reálných problémů z oblasti chemie, supermolekulární chemie či biochemie.

**Osnova:**

- 1. Co je to volná energie a její postavení v termochemii a kinetice. Experimentální metody měření. Statistická fyzika a volná energie.
- 2. Stručný přehled vybraných metod výpočetní chemie. Monte-Carlo simulace versus molekulová dynamika. Metody výpočtu potenciální energie (ab initio metody, molekulová mechanika). Rozdíl mezi plochami potenciální (PES) a volné energie (FES).
- 3. Přehled metod výpočtů volné energie. Metody koncových stavů, alchemické přeměny, metody potenciálu střední síly. Speciální metody.
- 4. Metody koncových stavů. Použití statistických metod pro lokální extrémy na PES. MM/PB(GB)SA. Výpočet solvatačních volných energií. Výpočet entropických příspěvků.
- 5. Alchemické přeměny. Free energy perturbation. Termodynamická integrace. Problémy se zánikem a vytvářením atomů. Soft-core potenciál. Staging versus sampling.
- 6. Metody potenciálu střední síly (PMF). Vzorkovací problém. Přehled metod. Metoda Adaptive Biasing Force. Metoda Blue Moon. Umbrella Sampling. Metadynamika. Metoda více chodců.
- 7. Speciální metody. Metody zlepšující vzorkování. Replika-exchange molekulová dynamika, atd.

**Výukové metody:** přednáška, diskuze

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

**Literatura:**

- Leach, Andrew R. *Molecular modelling :principles and applications*. 2nd ed. Harlow : Prentice Hall, 2001. xxiii, 744. ISBN 0-582-38210-6. info
- *Free energy calculations :theory and applications in chemistry a biology*. Edited by Christophe Chipot - Andrew Pohorille. Berlin : Springer, 2007. xviii, 517. ISBN 978-3-540-38447. info
- Cramer, Christopher J. *Essentials of computational chemistry :theories and models*. 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 2004. xx, 596 s. ISBN 0-470-09181-9. 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 Waalovy síly, Hydrofobní efekt.
2. Rozpoznávání molekul. Rozpoznávání a selektivita. Termodynamická a kinetická selektivita. Molekulární receptory. Chelátový a makrocyclický efekt. Preorganizace a komplementarita. Základní typy rozpoznávání, kationty, anionty, neutrální molekuly.
3. Rozpoznávání kationtů. Crown ethery. Cryptandy. Sferandy. Selektivita komplexace kationtů. Komplexace organických kationtů, vazba amoniového kationtu.
4. Calix[n]areny. Struktura a konformace kalixarenů, jednoduché chemické transformace kalixarenů. Komplexace kationtů, aniontů a neutrálních molekul kalixareny.
5. Rozpoznávání aniontů. Biologické receptory aniontů. Rozpoznávání aniontu a kationtu v závislosti na pH. Guadiniové, organometalické a neutrální receptory. Komplexace hydridového aniontu.
6. Rozpoznávání neutrálních molekul. Anorganické a organické klatráty (zeolity, močovina, dianin ad.). Cyklodextriny. Supramolekulární chemie fullerenů.
7. Struktura a stabilita molekulárních komplexů. Definice komplexační konstanty. Určení stechiometrie komplexu. Nejčastěji používané metody studia komplexů.
8. Dendrimery. Příprava a vlastnosti dendrimerů. Supramolekulární aplikace dendrimerů.
9. Supramolekulární syntéza, krystalové inženýrství. Mezimolekulové interakce. Růst krystalu. Strategie designu. Využití H-vazby, pí-pí stackingu a dalších interakcí.
10. Samovolná organizace (self-assembly, SA). Biochemická SA. SA v syntéze. Katenany a rotaxany. Helikáty, Programované supramolekulární syntézy. Uspořádávání
11. Supramolekulární reaktivita a katalýza. Příklady receptorů uplatňujících se v katalýze. Biologická mimika. Různé modely enzymových systémů.
12. Supramolekulární interakce v transportních procesech. Nosiče využívané v jednotlivých typech transportů. Povrchově aktivní látky. Micely, vesikuly. Preorganizace surfaktantů.
13. Supramolekulární "zařízení". Přenos informace, semiochemie. Supramolekulární fotochemie. Fotonická zařízení. Supramolekulární elektronická zařízení - přepínače, vodiče a polovodiče, usměrňovače. Nelineární optické materiály.
14. 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 - Strukturální analýza

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

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

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

**Osnova:**

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

- Braun, 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>

## C8951 NMR spektroskopie pevného stavu - základní principy a aplikace v chemii.

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

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

**Cíle předmětu:** Dvanáct lekcí přibližuje posluchačům nejenom základní principy NMR spektroskopie pevného stavu, ale především současné trendy, které umožňují detailní posouzení struktury a dynamiky látek v tuhém stavu. Nedávný technický a metodický rozvoj vedl k navržení řady nových experimentálních postupů, které vedou k odstranění anizotropie jaderných interakcí a podstatnému zvýšení rozlišení NMR spekter. Tato spektra jsou pak mnohdy svou kvalitou srovnatelná s NMR spektry roztoků a kapalin. Základním principům těchto technik jsou věnovány úvodní přednášky. Největší prostor je však věnován více-dimenzionálním korelačním a separačním technikám, které nevyžadují izotopické obohacení studovaného materiálu, a které v některých případech umožňují přesný popis molekulární struktury, konformace a pohyblivosti jednotlivých strukturálních jednotek. Stranou však nezůstávají ani experimentální techniky umožňující popis globální struktury izotopicky obohacených polypeptidů a proteinů. Závěrečné přednášky jsou pak věnovány problematice studia kvadrupolárních jader se spinem větším než a technickým (experimentálním) podmínkám, jejichž splnění je nezbytně nutné pro kvalitní provedení NMR experimentu v tuhé fázi.

**Osnova:**

- **1. Úvod do NMR pevné fáze:** Základní přehled jaderných (anizotropních) interakcí s magnetickým polem a jejich důsledek na vzhled (rozšíření) NMR spekter. Základní principy rušení anizotropních jaderných interakcí (rotace vzorku pod magickým úhlem MAS, dipolární dekapling). Rozdíly a podobnosti NMR spekter roztoků a tuhých látek (homogenní a nehomogenní rozšíření signálů prvek neuspořádání). Rotace vzorku tření povrchu kyvety se vzduchem vzrůst teploty. **2. Detailní rozbor anizotropie jaderných interakcí techniky rušení jaderných interakcí:** Detailní popis jaderných interakcí: anizotropie chemického posunu (CSA), dipol-dipolové interakce (přímé přes prostor), kvadrupolární interakce. Rozbor technik rušení jaderných interakcí: rotace vzorku pod magickým úhlem (MAS), heteronukleární dipolární decoupling (cw, TPPM, XiX), homonukleární dipolární decoupling (WHH-4, BR-24, FSLG, PMLG), dvojitá rotace (DOR, DAS). **3. Techniky přenosu polarizace:** Heteronukleární ( $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ -X) přenos polarizace; zvýšení citlivosti měření pomocí cross-polarizace (CP) dynamika přenosu polarizace; Hartmann-Hahnova podmínka vliv frekvence MAS na citlivost a nastavení parametrů měření. Problematika CP jader se spinem větším než . Homonukleární přenos polarizace spinová difuze  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  (vhodná sonda k posouzení velikosti částic v heterogenních systémech). **4. Techniky editace jedno-dimenzionálních spekter:** Možnosti potlačení rotačních signálů (TOSS, SELTICS); potlačení signálů uhlíků s přímo-vázanými protony v důsledku rychlé ztráty  $^{13}\text{C}$  koherence (NQS); editační techniky založené na vlivu různé velikosti  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  heteronukleárních dipolárních interakcí ve skupinách C, CH,  $\text{CH}_2$ , a  $\text{CH}_3$  při cross-polarizaci (CPPI); vliv pohyblivosti funkčních skupin a segmentů; editační techniky založené na velikosti a vývoji nepřímé J spin-spinové interakce (SoS-APT); různé možnosti manipulace se spinovým systémem (vývoj jedno-quantové a více-quantové koherence). Aplikace na jednoduchých i komplikovaných spinových systémech (např. Gly, Ala, simvastatin). **5. Separace širokých čar struktura vs. segmentální dynamika:** Jednoduchá separace  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  dipolárních interakcí podle  $^{13}\text{C}$  chemického posunu kvalitativní posouzení segmentální dynamiky; zavedení periody pro spinovou difuzi (stanovení velikosti částic v heterogenních systémech); určování pozice molekul vody. Separace heteronukleárních  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  dipolárních interakcí podle  $^{13}\text{C}$  chemického posunu kvantitativní posouzení segmentální dynamiky amplituda reorientace funkční skupiny. Aplikace na polymerních směsích (polyethylenoxid-polykarbonát), sítích (polyimid-polydimethylsiloxan), polypeptidech, nanokompozitech a anorganických materiálech. **6. Heteronukleární  $^1\text{H}$ -X korelační experimenty:** Přímé korelace přes prostor využití dipol-dipolových interakcí; jedno-vazebné korelace; identifikace vzdálených spinových párů; možnost měření meziatomových vzdáleností (3D HETCOR); porovnání selektivity a citlivosti s korelačními experimenty využívající nepřímé spin-spinové interakce ( $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HMQS-J-MAS). Možnosti inverzní detekce a gradientového výběru koherencí. Aplikace na středně velkých spinových systémech simvastatin. **7. Homonukleární  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  korelační experimenty:** Proč je tak komplikované provést experiment COSY v pevné fázi, když v roztoku je tím nejsnadnějším a nejzákladnějším korelačním experimentem? Problém relativně malého spektrálního rozlišení. Spinová difuze během směšovací periody místo vývoje J interakčních konstant posouzení homogenity či mísitelnosti směsí. Určení velikosti částic, ale i meziatomových  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  vzdáleností. Zvýšení spektrálního rozlišení v 3D experimentu  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ . Aplikace na polymerních komplexech a polymerních směsích, středně velkých spinových systémech (simvastatin) a malých organických molekulách. **8. Dvou-quantové  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$**

**korelační techniky - vodíkové vazby a  $\pi$ - $\pi$  interakce** Ultra-rychlé rotace vzorku pod magickým úhlem podstatně zvýšení spektrálního rozlišení (vážným omezením je extrémní zvýšení teploty vzorku); princip excitace dvou-quantové koherence a její následné konverze (back-to-back BABA sekvence). Měření meziatomových  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  vzdáleností. **9. Zvýšení spektrálního rozlišení X-X a X-Y korelace:** INADEQUATE v přirozeném izotopickém zastoupení; optimalizace heteronukleárního decouplingu transverse dephasing optimized INADEQUATE; DQF-COSY jednoduchá modifikace symetrické spektrum. Techniky vhodné pro případy úplného izotopického obohacení vzorku: především to je  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  PDS proton-driven spin diffusion, dále pak dvou-quantové modifikace užívající C7 a PC7 sekvence. Základní koncept dvojitych cross-polarizací, potlačení zpětného přenosu polarizace do  $^1\text{H}$  spinového systému Lee-Goldburg decoupling. **10. Techniky sekvenčního přiřazení polypeptidů a proteinů, určení struktury:** Diskuse základních experimentálních postupů, jež vedou k sekvenčnímu přiřazení signálů a následnému měření meziatomových vzdáleností, případně i torzních úhlů v proteinech a peptidech. 2D a 3D techniky pro určení intra-reziduální spinové konektivity C-C $^{\alpha}$ -C $^{\beta}$  a N-C $^{\alpha}$ -C $^{\beta}$  a inter-reziduální konektivity C $^{\alpha}$ -C $^{\beta}$  a N-C $^{\alpha}$ -C $^{\beta}$ . Volba směšovací periody. Využití přístupů běžných v NMR roztoků (NOE). Příprava vzorku. **11. Kvadrupolární jádra:** Kvadrupolární spektra rozšíření spekter druhého řádu; multi-quantové dvou-dimenzionální techniky vedoucí k částečné separaci kvadrupolové interakce a zvýšení spektrálního rozlišení; použití z-filtru; měření plného echa a další modifikace (např. FAM); vliv frekvence MAS; vliv intenzity magnetického pole a vliv intenzity excitačních polí na kvalitu výsledných 2D spekter. Korelační experimenty zahrnující kvadrupolová jádra ( $^1\text{H}$ - $^{27}\text{Al}$ ,  $^{29}\text{Si}$ - $^{27}\text{Al}$ ). **12. Technické aspekty úspěšného provedení NMR experimentu v pevné fázi:** Konstrukce sondy - teplotní rozsahy a kalibrace teplot; dvou-rezonanční sondy optimalizace (wobb); tři-rezonanční sondy vyměnitelný insert; ladění magického úhlu; optimalizace homogenity B0 pole - shimming; výkony excitačních a dekaplovacích polí minimální opakovací prodlevy; lineární zesilovače; základní specifikace prodlevy, pulsy, fáze; typy rotorů omezení a výhody.

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** zkouška ústní

**Literatura:**

- Melinda J. Duer, Solid-state NMR Spectroscopy: Principles and Applications. Blackwell Science, Oxford, 2002, ISBN 0-632-05351-8.

### C8953 NMR - Strukturní analýza - seminář

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

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

**Cíle předmětu:** Osvojení práce s 1D a 2D NMR spektry, jejich praktická analýza a interpretace, určení struktury neznámé látky na základě těchto spekter.

**Osnova:**

- Interpretace: 1. H-1 NMR spekter. 2. C-13 NMR spekter. 3. APT. 4.+5. 1D NOE a NOESY. 6. COSY. 7. TOCSY. 8. HSQC. 9. HMBC. 10.+11. Soubor spekter pro jeden vzorek. 12. Prezentace skupinového projektu.

**Výukové metody:** Praktické cvičení interpretace spekter k přednášce C8950; diskuze; skupinová práce.

**Metody hodnocení:** Účast na praktických cvičeních, skupinový projekt.

**Literatura:**

*doporučená literatura*

- Claridge, Timothy D. W. *High-resolution NMR techniques in organic chemistry*. 1st ed. Amsterdam : Pergamon, 1999. xiv, 382 s. ISBN 0-08-042798-7. 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
- Friebolin, Horst. *Basic one- and two-dimensional NMR spectroscopy*. Translated by Jack K. Becconsall. Weinheim : Wiley-VCH, ISBN 9783527327829. info

### C9000 Oborový seminář III

**Vyučující:** [RNDr. Miloš Černík CSc.](#), [prof. RNDr. Ivan Holoubek CSc.](#)

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

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

**Osnova:**

- 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)

### C9530 Strukturní biochemie

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

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

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

**Osnova:**

- 1-4. Pojem struktury makromolekul, základní strukturní motivy proteinů, nukleových kyselin, struktura sacharidů a membrán. 5. Výpočetní metody, molekulová mechanika a dynamika, simulované žihání. 6. Příprava vzorku, sekvenace nukleových kyselin, proteinů a sacharidů. 7. Optické metody charakterizace biomakromolekul: cirkulární dichroismus, infračervená spektroskopie. 8-9. Rentgenová strukturní analýza. Příprava krystalů, difrakční experiment, metody řešení fázového problému, mapy elektronové hustoty, výstavba strukturního modelu. 10-11. Nukleární magnetická rezonance. Izotopové značení, NMR experiment, přiřazení frekvencí ve spektrech, určení geometrie (NOE, interakční konstanty), dynamika proteinů. 12. Databáze struktur, bioinformatika, počítačové předpovídání a modelování.

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

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

#### Literatura:

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

## C9550 Strukturní chemie I

**Vyučující:** [Mgr. Markéta Munzarová Dr. rer. nat.](#), [prof. RNDr. Radek Marek Ph.D.](#)

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

**Cíle předmětu:** Absolvent kurzu získá základní přehled o elektronové struktuře molekul a jejím vlivu na mezimolekulární interakce, molekulární podstatě elektronových spekter, spekter magnetické rezonance. Na konci kurzu by měl porozumět obecnějším zákonitostem mezi molekulární strukturou a spektrálními parametry.

#### Osnova:

- **1. Elektronová struktura atomů, postuláty kvantové mechaniky.** Atomové orbitály, princip chemické vazby, molekulové orbitály, hraniční orbitály, těžké atomy. **2. Elektronová struktura molekul, symetrie molekul, orbitální interakce, AIM.** Molekulový ion H<sub>2</sub><sup>+</sup>. Aproximace oddělení pohybu elektronů a jader. Metoda MO-LCAO. Překryvový a interakční integrál, výsledné energie a vlnové funkce. Molekulové orbitály: grafické reprezentace a vlastnosti. **3. Mezimolekulární interakce, chemická vazba v pevných látkách.** Iontové síly, vodíkové vazby, CH...X, CH...pi, pi...pi interakce, van der Waals, elektrostatický potenciál. Plynná fáze, roztok, krystal. **4. Úvod do molekulové spektroskopie.** Principy: absorpce a emise záření, rozptyl záření. Rozsahy vlnových délek elektromagnetického záření a druhy excitace molekul. Komponenty spektrometru. Šířka a intenzita linií. **5. Spektra rotační, vibrační, elektronová, fotoelektronová, rentgenfluorescenční.** - energie vs. frekvence; studium dynamických procesů. **6. Magnetická rezonance.** Spin elektronu, spin jádra, meziatomové interakce, jev magnetické rezonance, molekuly v magnetickém poli. **7. Elektronová paramagnetická rezonance,** elektron v magnetickém poli, g-faktor, hyperjemné štěpení **8. Nukleární magnetická rezonance,** jádro v magnetickém poli, Larmorova frekvence, radiofrekvenční pulz, interakce (paramagnetická, kvadrupolární, jaderné stínění, přímá interakce dipól-dipól, nepřímá spin-spinová interakce, spin-rotační interakce), spinové systémy. **9. Vektorový model NMR experimentu** – chemický posun, interakční konstanta, relaxace, FID, spinové echo **10. Nukleární Overhauserův jev,** princip, měření meziatomových vzdáleností, přenos polarizace. **11. 2D NMR spektroskopie,** COSY, HSQC, interpretace. **12. Aplikace,** NMR spektroskopie při vysokých polích, stanovení struktur biopolymerů, studium dynamických procesů, nové trendy v NMR spektroskopii, interpretace a prezentace NMR dat. **13. Hmotnostní spektrometrie** – ionizační techniky, fragmentace, využití ve strukturní chemii

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** 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
- *Chemical Bonding in Solids*. Jeremy K. Burdett. Oxford: Oxford University Press, 1995, 319 s. ISBN 0-19-508991-X
- Atkins, Peter William - Friedman, R. S. *Molecular quantum mechanics*. 3rd ed. New York : Oxford University Press, 1997. xvii, 545. ISBN 0-19-855948-8. info
- *Understanding NMR spectroscopy*. Edited by James Keeler. Chichester : Wiley, 2005. xv, 459 p. ISBN 9780470017876. info
- Levitt, Malcolm H. *Spin dynamics :basics of nuclear magnetic resonance*. Chichester : John Wiley & Sons, 2001. xxiv, 686. ISBN 0-471-48922-0. info

## C9551 Strukturální chemie II

**Vyučující:** [prof. RNDr. Radek Marek Ph.D.](#), [doc. Mgr. Marek Nečas Ph.D.](#), [Mgr. Zdeněk Kříž Ph.D.](#)

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

**Cíle předmětu:** Absolventi kurzu by měli být schopni porozumět a vysvětlit základy rentgenové difrakce a molekulového modelování - dvou důležitých metod strukturální chemie.

**Osnova:**

- **1. Periodické soustavy** – pohled do krystalové struktury, síly určující tvorbu krystalů. **2. NMR spektroskopie pevného stavu**, anizotropní interakce, tenzor chemického posunu, dipolární interakce, rotace pod magickým úhlem (MAS), křížová polarizace (CP). **3. Difrakční metody**. Vnitřní struktura krystalů. Krystalová struktura, mřížka a základní buňka. Krystalové souřadnice, směry a roviny. Základní anorganické struktury. Struktury kovových, iontových a molekulárních krystalů. **4. Difrakce**. Vlastnosti RTG záření a jeho zdroje. Interakce RTG záření s krystalem. Braggův zákon. Vztah mezi elektronovou strukturou a difrakčním obrazem. Rozptyl RTG záření na atomech. Atomový rozptylový faktor. Automatické difraktometry - monokrystalové a práškové. **5. Vnější a vnitřní symetrie krystalů**. Prvky a operace symetrie. Prostorové grupy. **6. Fourierovy řady a jejich využití v krystalografii**. Strukturální faktor. Fázový problém. Řešení a upřesňování struktur. Softwarové balíky pro zpracování krystalových struktur. **7. Aplikace**. Krystalografie dnes - synchrotrony, stanovení struktur biopolymerů, stanovení struktur z práškové difrakce, studium nábojových hustot. Zpracování, interpretace a prezentace krystalografických dat (CIF, Mercury, DIAMOND). Krystalografické databáze (CSD, ICSD, PDB). **8. Molekulové modelování**. Úvod, základní principy a metody molekulového modelování, používaný software. **9. Molekulová mechanika**. Empirická silová pole a jejich vlastnosti, termy používané v empirických silových polích a popis interakcí, vývoj a testování parametrů silových polí. **10. Molekulová dynamika**. Základní principy, parametry ovlivňující MD simulace, constraint molecular dynamics, analýzy dat získaných z MD simulací. **11. Modelování mezimolekulových interakcí**. Solvatace molekuly a solvatační modely, jejich druhy a použití, molekulové dokování - základní principy. **12. Modelování krystalů**. Molekulové klastry, periodičita. **13. Metody kvantové chemie a jejich aplikace na chemické problémy**. Metoda Hartree-Fockova (HF) a její nadstavby (CI, MP). Metoda funkcionálu hustoty (DFT). Báze v ab initio výpočtech, dostupné balíky kvantově-chemických programů. Postup při aplikaci kvantové mechaniky na chemické problémy, vhodnost a výpočetní náročnost jednotlivých metod.

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška

**Literatura:**

- Valvoda, Václav. *Základy strukturální analýzy*. 1. vyd. Praha : Karolinum, 1992. 489 s. ISBN 80-200-0280-4. info
- *Fundamentals of crystallography*. Edited by Carmelo Giacovazzo. 2nd ed. Oxford : Oxford University Press, 2002. xix, 825 s. ISBN 0-19-850958-8. info
- *Molecular modelling :principles and applications*. Edited by Andrew R. Leach. 1st ed. Essex : Longman, 1998. xvi, 595 s. ISBN 0-582-23933-8. info
- *Reviews in computational chemistry*. Edited by Kenny B. Lipkowitz - Donald B. Boyd. New York : VCH Publishers, 1996. 414 s. ISBN 1-56081-915-4. info

## C9920 Úvod do kvantové chemie

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

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

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

**Osnova:**

- 1. Základní koncepty kvantové mechaniky. Historie a současnost kvantové chemie (QCH). 2. Atom vodíku. 3. Atomy s více elektrony. 4. Molekulový ion  $H_2^+$  : Metoda MO-LCAO. 5. Molekuly s více elektrony: Jednoduchá a rozšířená 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 jednelektronových přístupů (kanonické MO, NBO). Nově se kurz věnuje i technikám optimalizace geometrie stejně jako strategiím zahrnutí dynamiky a solvatace. Cíle: osvojení základů metod QCH, pochopení postupu při výpočtu konkrétních molekulových vlastností, interpretace výsledků.

**Osnova:**

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

**Výukové metody:** Přednášky vč. diskuse, konzultace.

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

**Literatura:**

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

## F5030 Základy kvantové mechaniky

**Vyučující:** [doc. Mgr. Dominik Munzar Dr.](#)

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

**Cíle předmětu:** Jde o základní kurz kvantové mechaniky. Hlavní cíle kurzu jsou: zvládnutí základního matematického aparátu používaného v kvantové mechanice; pochopení pojmů amplitudy pravděpodobnosti a vlnové funkce; zvládnutí řešení Schroedingerovy rovnice v jednoduchých situacích (potenciálové jámy, schody a bariéry, harmonický oscilátor, atom vodíku); schopnost aplikovat přibližné metody (poruchová teorie a variační metoda) v nejjednodušších situacích.

**Osnova:**

- I. Úvodní část
- 1. Prvky fyziky mikrosvěta: diskretnost, vlnově-částicový dualismus, neurčitost, komplementarita.
- 2. Jednočásticová vlnová mechanika: De Broglieho vlny, Schroedingerova rovnice, obecné vlastnosti řešení v jednorozměrném případě, částice v potenciálové jámě, tunelování přes potenciálovou bariéru, zmínka o aplikacích v oblasti polovodičových nanostruktur.
- 3. Pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce a její Fourierovy transformace, střední hodnoty funkcí závislých na poloze a hybnosti, relace neurčitosti pro polohu a hybnost.
- 4. Příklady systémů s konečnou dimenzí a náznak jejich kvantověmechanického popisu (částice, pro kterou je dostupných pouze několik diskretních hladin, spin, polarizační stav světla).
- II. Formalismus
- 1. Abstraktní Hilbertův prostor, stavové vektory a jejich reprezentace, lineární operátory a jejich reprezentace, hermiteovské operátory a jejich vlastnosti.
- 2. Postuláty kvantové mechaniky týkající se popisu stavu systému, fyzikálních veličin a měření; relace neurčitosti v obecném případě, úplné soubory navzájem komutujících operátorů.
- 3. Časový vývoj: Schroedingerova rovnice v obecném případě, Heisenbergova reprezentace, souvislosti s klasickou fyzikou (Ehrenfestovy věty, klasická limita Schroedingerovy rovnice), stacionární případ.
- III. Aplikace
- 1. Harmonický oscilátor: řešení problému algebraickou metodou, s využitím kreačních a anihilačních operátorů, energiové spektrum a vlnové funkce, limita velkých kvantových čísel, zmínka o použití v teorii záření černého tělesa a v teorii dynamiky jader.
- 2. Moment hybnosti v kvantové mechanice: komutační relace pro složky orbitálního momentu hybnosti částice, rozšíření na složky celkového momentu hybnosti libovolného systému, stanovení vlastních hodnot velikosti momentu hybnosti a vybrané složky momentu hybnosti algebraickou metodou, vlastní funkce v případě orbitálního momentu hybnosti, popis spinu elektronu, skládání momentů hybnosti (v náznaku).
- 3. Centrální pole: zjednodušení problému s využitím rotační symetrie hamiltoniánu, radiální Schroedingerova rovnice a náznak řešení, energiové spektrum a vlnové funkce atomu vodíku.
- 4. Přibližné metody: stacionární teorie poruch pro nedegenerované energiové hladiny i pro degenerovaný případ, nestacionární teorie poruch, pravděpodobnost přechodu mezi hladinami vlivem poruchy, Fermiho zlaté pravidlo, zmínka o aplikacích v teorii optické odezvy, variační metoda, zmínka o aplikacích v kvantové chemii.
- 5. Systémy identických částic: postulát o symetrii/antisymetrii vlnových funkcí souboru identických částic vůči výměně částic, bosony a fermiony, vztah mezi symetrií a spinem, Pauliho princip, vlnové funkce souborů neinteragujících částic, zmínka o aplikacích v teorii kondenzovaných látek (základní stav Bose-Einsteinova kondenzátu, Fermiho moře).

**Výukové metody:** Přednášky a řešení příkladů ve cvičení.

**Metody hodnocení:** Kurz je ukončen zkouškou, která má písemnou část (test obsahující zhruba 20 jednoduchých otázek a krátkých příkladů a písemná práce obsahující dvě až tři úlohy) a ústní část. Nutnou podmínkou pro úspěšné absolvování zkoušky je získání alespoň poloviny bodů z testu. Podmínkou přístupu ke

zkoušce je aktivní účast na cvičeních a získání alespoň poloviny bodů z průběžně zadávaných písemných prací. V odůvodněných případech stanoví cvičící náhradní formu splnění této podmínky.

#### Literatura:

- Zettili, Nouredine. *Quantum mechanics :concepts and applications*. Chichester : John Wiley & Sons, 2001. xiv, 649 s. ISBN 0-471-48944-1. info
- Formánek, Jiří. *Úvod do kvantové teorie*. Vyd. 2., upr. a rozš. Praha : Academia, 2004. xx, 502, 1. ISBN 80-200-1176-5. info
- Griffiths, David Jeffrey. *Introduction to quantum mechanics*. Englewood Cliffs : Prentice Hall, 1995. 9, 394 s. ISBN 0-13-124405-1. info
- Marx, György. *Úvod do kvantové mechaniky*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1965. 294 s. info
- Landau, Lev Davidovič - Lifšic, Jevgenij Michajlovič. *Quantum mechanics :non-relativistic theory*. Edited by J. S. Bell, Translated by J. B. Sykes. 3rd ed., rev. and enl. Amsterdam : Butterworth-Heinemann, 1977. xv, 677 s. ISBN 0-7506-3539-8. info
- Blochincev, D. I. *Základy kvantové mechaniky [Blochincev, 1956]*. 1. vyd. Praha : Nakladatelství Československé akademie věd, 1956. 545 s. info
- Matthews, Paul T. *Základy kvantové mechaniky [Matthews, 1976]*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1976. 256 s. info
- Celý, Jan. *Základy kvantové mechaniky pro chemiky. I, Principy [Celý, 1986]*. 1. vyd. Brno : Rektorát UJEP, 1986. 176 s. info
- Celý, Jan. *Základy kvantové mechaniky pro chemiky. II, Aplikace*. 1. vyd. Brno : Rektorát UJEP, 1983. 161 s. info
- Davydov, Aleksandr Sergejevič. *Kvantová mechanika [Davydov, 1978] : Kvantovaja mechanika (Orig.)*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1978. 685 s. info
- Liboff, Richard L. *Introductory quantum mechanics*. 2nd ed. Reading : Addison-Wesley Publishing Company, 1993. vii, 782 s. ISBN 0-201-54715-5. info
- Pišút, Ján - Gomolčák, Ladislav - Černý, Vladimír. *Úvod do kvantovej mechaniky [Pišút, 1983]*. 2. vyd. Bratislava : Alfa, 1983. 551 s. info
- Landau, Lev Davidovič - Lifšic, Jevgenij Michajlovič. *Úvod do teoretickej fyziky. 2, Kvantová mechanika*. 1. vyd. Bratislava : Alfa, 1982. 357 s. 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 difraktometrii
- 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 polykryštalických látkach*. 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)