

Obor **Anorganická chemie** – doporučený studijní plán

1. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinné předměty					
C5020	Chemická struktura	2+2	2/0	zk	Brož
C5030	Chemická struktura - seminář	1	0/1	z	Brož
C7000	Oborový seminář I	2	0/2	z	Černík, Pinkas
C7001	Diplomová práce I	3	0/0/3	kz	vedoucí práce
C7700	Chemie nekovů	2+2	2/0	zk	Černík
C7777	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	Příhoda
Povinně volitelné předměty					
_	Povinně volitelné předměty	3			
Doporučené volitelné předměty					
_	Doporučené volitelné předměty	13			
Jarní semestr					
Povinné předměty					
C4010	Anorganická chemie III	2+2	2/0	zk	Černík, Příhoda
C4015	Anorganická chemie III - seminář	1	0/1	z	Černík, Příhoda
C6950	Chemická exkurze	0	0/0	z	Janků
C6960	Odborná praxe	0	0/0	z	Šindelář
C8000	Oborový seminář II	2	0/2	z	Černík, Pinkas
C8001	Diplomová práce II	5	0/0/5	kz	vedoucí práce
C8810	Chemie přechodných prvků	2+2	2/0	zk	Novosad
Povinně volitelné předměty					
_	Povinně volitelné předměty	5			
Doporučené volitelné předměty					
_	Doporučené volitelné předměty	9			

2. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinné předměty					
C5880	Základy stereochemie	2+2	2/0	zk	Černík, Toužín
C5885	Základy stereochemie - seminář	1	0/1	z	Černík, Toužín
C7740	Organokovové sloučeniny	1+2	1/0	zk	Novosad
C7777	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	Příhoda
C9000	Oborový seminář III	2	0/2	z	Černík, Pinkas
C9001	Diplomová práce III	12	0/0/12	kz	vedoucí práce
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelné předměty	2			
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	6			
Jarní semestr					
Povinné předměty					
CA000	Oborový seminář IV	2	0/2	z	Černík
CA001	Diplomová práce IV	20	0/0/20	kz	vedoucí práce
JA002	Pokročilá odborná angličtina - zkouška	2	0/0	zk	Hranáčová
Doporučené volitelné předměty					
-	Doporučené volitelné předměty	6			

Povinně volitelné předměty

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
Podzimní semestr					
Povinně volitelné předměty					
C5040	Jaderná chemie	2+2	2/0	zk	Příhoda
C5380	Speciální laboratorní technika	1+2	1/0	zk	Černík
C6180	Pokročilá organická chemie - praktikum	5	0/0/5	kz	Paruch
C7780	Inorganic Materials Chemistry	2+2	2/0	zk	Pinkas
C8840	Chemie makrocyclických sloučenin	2+2	2/0	zk	Lubal
C9550	Kvantová chemie a molekulová spektroskopie	2+2	2/0	zk	Munzarová, Marek
C9920	Úvod do kvantové chemie a elektronové struktury molekul	3+2	2/1	zk	Munzarová
GE091	Mineralogie a geochemie	3	2/0	kz	Losos
Jarní semestr					
Povinně volitelné předměty					
C6020	Jaderná chemie - laboratorní cvičení	3	0/0/3	kz	Křivohlávek
C6250	Metody chemického výzkumu - praktikum	5	0/0/5	kz	Farková, Vrbková
C6320	Chemická kinetika	2+2	2/0	zk	Sopoušek
C6330	Chemická kinetika - seminář	1	0/1	z	Sopoušek
C6800	Multinukleární NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	Pinkas
C8070	Molekulová spektroskopie	2+2	2/0	zk	Černík, Toužín
C8400	Kvantová chemie pevných látek, výpočty elektronové struktury	2+2	2/0	zk	Šob
C8700	Technologie chemických výrob	2+2	2/0	zk	Šindelář
C8800	Rtg strukturní analýza	2+2	2/0	zk	Marek
C8885	Supramolekulární chemie	2+2	2/0	zk	Mazal
C9930	Metody kvantové chemie	2+2	2/0	zk	Munzarová

Obor Anorganická chemie – státní závěrečná zkouška

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

Povinné předměty

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

Volitelné předměty

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

Zkouška klade důraz na důkladné porozumění souvislostem a poznatkům získaným absolvováním povinných a povinně volitelných kurzů magisterského studia, přihlédnuto je ke specializaci kandidáta, dané zaměřením jeho diplomové práce. Rámcové okruhy témat ke státní závěrečné zkoušce jsou uvedeny níže. Součástí státní závěrečné zkoušky je též obhajoba diplomové práce, při níž má uchazeč prokázat schopnost prezentovat získané výsledky a orientovat se v problematice specializované oblasti i širší disciplíny na současné odborné úrovni. Obhajoba diplomové práce má formu ústní prezentace, během níž uchazeč seznámí komisi a posluchače s tématem a cíli práce, řešenými problémy, použitými metodami a získanými výsledky. Odpovídá na připomínky a dotazy obsažené v posudcích vedoucího a oponenta práce a reaguje na dotazy vznesené v průběhu diskuse.

Okruhy otázek:

Povinné předměty

1. Systematická anorganická chemie

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

Alkalické kovy a jejich sloučeniny, organolithné sloučeniny. Iontové sloučeniny a jejich základní strukturní typy. Berylium, hořčík a kovy alkalických zemin. Rozpustnost anorganických sloučenin. Grignardovo činidlo. Bor, diboran, elektronově deficitní molekuly a třicenterní dvouelektronová vazba. Hydroborace. Borany, karborany a jiné heteroborany. Teorie elektronových párů v polyedrických skeletech (PSEPT) a předpověď struktury boranových klastrů. Halogenidy boru. Oxidy, kyselina boritá a boritany. Borazany a nitrid boru. Hliník, gallium, indium, thallium. Oxidy, korund a spinel. Amfoterní vlastnosti Al_2O_3 . MAO. Polyiminoalany.

Uhlík, karbidy. Vazba v molekulách fullerenu a jejich chemická reaktivita. Endohedrání sloučeniny fullerenu, nanotrubičky. Chemické vlastnosti grafitu. Interkaláty grafitu. Křemík, germanium, cín, olovo. Kovy, polovodiče a izolanty. Inertní elektronový pár. Násobné vazby mezi prvky hlavních skupin. Silikáty, alumosilikáty, zeolity. Silikony. Dusík. Oxidy a kyseliny dusíku. Amoniak, binární nitridy. Komplexy N_2 a fixace dusíku. Fosfor, fosfany, fosforany, fosforečnany, fosfazený. Hypervalentní sloučeniny. Organofosfáty. Arsen, antimon, bismut. Struktura a chemie Zintlových fází. Singletové a tripletové stavy molekuly kyslíku. Oxidy, metody přípravy, struktura a chemické vlastnosti. Chemie oxokyselin a jejich solí. Peroxidy, superoxidy a ozonidy. Sulfidy, selenidy a teluridy. Chemie thiokyselin, jejich solí a dalších derivátů. Kationty a anionty chalcogenů. Halogeny, jejich oxidy a oxokyseliny. Halogenidy, příprava, struktura a chemické vlastnosti binárních a smíšených halogenidů. Interhalogenové sloučeniny. Vzácné plyny a jejich sloučeniny.

Koordinační chemie, oktaedrické, tetraedrické, čtvercově planární a trigonálně bipyramidální komplexy. Stabilizační energie ligandového pole. Vysokospinové a nízkospinové komplexy, spektrochemická řada. Vazba v koordinačních sloučeninách, teorie ligandového pole. Stereochemie a izomerie koordinačních sloučenin. Obecné periodické trendy u přechodných kovů. Přechodné kovy 3. skupiny a vzácné zeminy, lanthanoidová kontrakce. Titan, zirkonium, hafnium, Krollův proces. Ziegler-Nattovy a metalocenové katalyzátory. Vanad niob, tantal. Oxo a polyoxoanionty. Chrom, molybden, wolfram. Iso- a heteropolyoxoanionty. Bronzy. Trojná a čtverná vazba. Klastrové sloučeniny. Mangan, technecium, rhenium. Triáda železa. Oxidy železa a výroba železa. Ferrocen. Hydrogenace a hydrogenační katalyzátory. Wilkinsonův katalyzátor. Platinové kovy. Homogenní katalýza. Vaskův komplex. Spin-orbitální interakce. Trans efekt. Skupina 11-mincovní kovy. Měď, stříbro, zlato. Jahn-Tellerův efekt. Supravodiče. Aurofilicita. Zinek, kadmium, rtuť, metalloenzymy. Aktinoidy. Uran a jeho sloučeniny, příprava a použití.

2. Struktura a vlastnosti anorganických sloučenin a metody jejich studia

Tvar a geometrie molekul nepřechodných prvků, model VSEPR. Symetrické vlastnosti molekul, prvky a operace symetrie, základní pojmy teorie grup. Elektronová struktura atomů a iontů, atomové

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

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

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

Volitelné předměty

1. Koordinální chemie

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

2. Chemie pevné fáze a anorganických materiálů

Strukturní chemie

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

Syntéza anorganických materiálů

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

3. Organometalická chemie

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

Literatura:

- Toužín, J. *Stručný přehled chemie prvků*. Skripta MU Brno, 2003.
- Greenwood, N. N. - Earnshaw, A. *Chemie prvků I, II*. Informatorium, Praha, 1993.
- Klikorka, J. - Hájek, B. - Votinský, J. *Obecná a anorganická chemie*. SNTL, Praha, 1989.
- House, J. - House, K. A. *Descriptive Inorganic Chemistry*. Academic Press, 2010.
- Wulfsberg, G. *Principles of Descriptive Inorganic Chemistry*. University Science Books, 1991.
- Housecroft, C. E. - Sharpe, A. *Inorganic Chemistry*. Prentice Hall, New York, 2012.
- Cotton, F. A. - Murillo, C. - Wilkinson, G. - Bochmann, M. - Grimes, R. *Advanced Inorganic Chemistry*. Wiley-Interscience, New York, 1999.
- Greenwood, N. N. - Earnshaw, A. *Chemistry of the Elements*. Butterworth - Heinemann, Oxford, 1997.
- Rayner-Canham, G. - Overton, T. *Descriptive Inorganic Chemistry*. W. H. Freeman, 2009.
- Rodgers, G. E. *Descriptive Inorganic, Coordination, and Solid-State Chemistry*. Cengage Learning, 2011.
- Shriver, D., Peter Atkins, P. *Inorganic Chemistry*. W. H. Freeman, 2009.
- Holleman, A. F. , Wiberg, E., Wiberg, N. *Inorganic Chemistry*. Academic Press, 2001.
- Elschenbroich Ch. - Salzer A. *Organometallics*, VCH Publishers, New York 1989.
- Kašpárek F. *Přehled organosloučenin přechodných kovů*. UP Olomouc 1994.
- Kašpárek F. *Chemie organokovových sloučenin*. UP Olomouc 1991.
- Hill A. F. *Organotransition Metal Chemistry*. Royal Society of Chemistry, Cambridge 2001.
- Ebsworth, E.A.V., Rankin, D.W.H., Cradock, S. *Structural methods in inorganic chemistry*. 2nd ed. - Boca Raton, Fla. : CRC Press, 1991.
- Rankin, D. W. H., Mitzel, N., Morrison, C. *Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry*. Wiley, 2013. ISBN 0470972793.
- Toužín, J., Černík, M. *Vibrační spektroskopie molekul a krystalů*. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1980.
- Schubert, U., Hüsing, N. *Synthesis of Inorganic Materials. 3rd Ed. 2012. ISBN 978-3-527-32714-0 - Wiley-VCH, Weinheim*.
- Nakamoto , K. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Applications in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry*. ISBN 0470405872. John Wiley & Sons, 2009.
- Toužín, J., Černík, M. *Základy stereochemie anorganických sloučenin*. SPN, 1985
- Gillespie, R. J., Popelier, P. L. A., Vargas-Baca, I. *Chemical Bonding and Molecular Geometry: From Lewis to Electron Densities*. Oxford University Press, 2007.
- von Zelewsky, A. *Stereochemistry of Coordination Compounds*. John Wiley & Sons, 1996.
- Müller, U. *Inorganic Structural Chemistry*. John Wiley & Sons, 2007.
- Wells, A. F. *Structural Inorganic Chemistry*. OUP Oxford, 2012.