

Obor Biofyzikální chemie

Státní závěrečná zkouška sestává z obhajoby bakalářské práce a písemné zkoušky ze čtyř povinných předmětů (Obecná a fyzikální chemie, Biochemie, Biofyzikální chemie) a jednoho povinně volitelného předmětu z výběru: Anorganická chemie, Organická chemie, Analytická chemie. Příslušné znalosti získá student absolvováním povinných a povinně volitelných předmětů studijního plánu. Okruhy otázek pro jednotlivé předměty jsou uvedeny níže. Při písemné zkoušce je povolena kalkulačka.

Okruhy otázek – povinné předměty:

Obecná a fyzikální chemie

Hmota a energie. Struktura atomového jádra a atomu. Základní chemické slučovací zákony. Elektronová struktura atomů. Vlnová funkce, Schrödingerova rovnice, atomové orbitály, energie atomových orbitalů ve vodíkovém atomu. Periodicita elektronových konfigurací a periodicita vlastností atomů.

Základní a excitovaný stav, atomová spektra. Elektronová struktura molekul. Teorie valenční vazby. Hybridizace atomových orbitalů. Teorie molekulových orbitalů (MO). Typy a tvary molekulových orbitalů, typy kovalentních vazeb (s, p, d). Řád vazby. Polarizovatelnost molekul. Iontové sloučeniny a iontová vazba. Zjišťování krystalové struktury, difrakce roentgenova záření. Kovová vazba, síla vazby. Slabé interakce mezi molekulami, vazba vodíkovým můstkem, van der Waalovy síly. Elektrické, magnetické a optické vlastnosti molekul. Interakce záření s hmotou.

Chemická termodynamika. Tepelná rovnováha, teplota, tlak, nultá věta. První věta, vnitřní energie, teplo, práce. Entalpie, tepelné kapacity. Druhá věta. Entropie, termodynamická reverzibilita. Chemický potenciál. Třetí věta.

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.

Vlastnosti kapalin a mezimolekulární síly. Tenze par kapaliny. Osmotický tlak.

Elektrolytická disociace iontových látek, Vodivost iontů, silné a slabé elektrolyty, elektrolytická vodivost, aktivita elektrolytu, aktivitní koeficient, iontová síla roztoku.

Rovnovážná elektrochemie. Termodynamika roztoků elektrolytů. Galvanické a elektrolytické články. Standardní potenciál elektrody. Druhy elektrod. Oxidace a redukce. Elektroda prvního a druhého druhu, Nernstova rovnice, vodíková elektroda, galvanický článek. Oxidoredukční elektroda, Petersova rovnice. Změna Gibbsovy volné energie a rovnovážná konstanta elektrochemických reakcí. Disproporcionační reakce. Faradayův zákon.

Kinetická teorie ideálního plynu, Maxwell-Boltzmannova funkce rozdělení rychlostí, střední kinetická energie a rychlost molekul plynu, počet mezimolekulárních srážek. Ideální plyn, stavová rovnice ideálního plynu.

Chemická kinetika. Rychlost chemických reakcí, rychlostní zákon, rychlostní konstanta a řady reakcí. Molekularita. Vratné, následné, paralelní a řetězové reakce. Fyzikální a chemická adsorpce. Srážková teorie, účinné srážky. Teorie aktivovaného komplexu. Reakční koordináta, aktivační energie, vliv teploty na reakční rychlost. Katalýza: katalyzátory, katalyzované reakce, autokatalýza, homogenní katalýza. Adsorpce a chemisorpce, heterogenní katalýza. Fotochemické reakce. Radikálové reakce.

Biochemie

Aminokyseliny - chemické a fyzikální vlastnosti aminokyselin. Kódované a nekódované aminokyseliny, aminokyseliny esenciální. Peptidy - peptidická vazba. Bílkoviny - struktura. Chemické a fyzikální vlastnosti bílkovin. Rozdělení bílkovin podle struktury a funkce.

Jednoduché a složené lipidy - význam, fyzikálně chemické vlastnosti.

Monosacharidy - rozdělení, stereoizomerie, typy vzorců obecné reakce. Oligosacharidy a polysacharidy - rozdělení podle funkce a struktury.

Nukleové kyseliny - složení DNA a RNA - báze, nukleosidy a nukleotidy, struktura a funkce.

Vlastnosti enzymů - nomenklatura a názvosloví, vyjadřování enzymové aktivity, aktivní centrum, specifita a mechanismus účinku. Enzymová kinetika - vliv vnitřních a vnějších faktorů na enzymovou reakci.

Metabolismus - tři stupně metabolismu. Katabolismus a anabolismus.

Bioenergetika - energetika enzymových reakcí. Makroergické sloučeniny. ATP - substrátová a oxidační fosforylace, fotofosforylace.

Respirační řetězec a oxidační fosforylace - uspořádání, energetický výtěžek. Vznik ATP - chemiosmotická teorie.

Cyklus trikarboxylových kyselin - chemismus a energetická bilance, vztah k ostatním metabolickým procesům.

Metabolismus sacharidů - štěpení a biosyntéza polysacharidů. Aerobní glykolýza a dekarboxylace pyruvátu, chemismus a energetický zisk. Anaerobní glykolýza - mléčné a alkoholové kvašení, chemismus a energetický zisk. Pentozový cyklus. Glukoneogeneze.

Fotosyntéza - fotosyntetické pigmenty. Světelná a temná fáze.

Metabolismus lipidů - odbourávání jednoduchých a složených lipidů - lipázy a fosfolipázy. Odbourávání a biosyntéza mastných kyselin.

Metabolismus bílkovin a aminokyselin - proteolýza, proteázy - rozdělení a účinek, trávení bílkovin. Hlavní přeměny aminokyselin - transaminace, deaminace, dekarboxylace. Detoxikace amoniaku - tvorba k. močové, amidů a močoviny - močovinový cyklus.

Biofyzikální chemie

Termodynamika biologických systémů (Gibbsova a Helmholtzova volná energie, entalpie, entropie). Statistická termodynamika (Boltzmannova pravděpodobnost, statistická interpretace entropie, kanonický strukturální soubor). Bioenergetika (přeměny energie v organismech).

Struktura nukleových kyselin a proteinů. Helikální struktury. Ramachandranův diagram.

Význam nekovalentních interakcí a jejich úloha ve struktuře a funkci biopolymerů.

Specifické fyzikálně-chemické vlastnosti vody.

Kinetika v biologických systémech, enzymová kinetika Michaelis-Mentenové, inhibice enzymů, vícesubstrátová kinetika, farmakokinetika.

Elektrochemie v biologických systémech. Roztoky elektrolytů a polyelektrolytů, jejich acidobazické rovnováhy. Protionty, expanze polyiontů. Kyselost roztoků (pH, pufry, pKa, pI).

Polopropustné membrány v živých soustavách. Mechanické a elektrické vlastnosti biologických membrán. Přenos hmoty a informace.

Koligativní vlastnosti (osmóza, Donnanova rovnováha).

Metody studia prostorového uspořádání biopolymerů. Rentgenová krystalografie, mapy elektronových struktur. Spektrální vlastnosti biopolymerů. Aplikace NMR UV-Vis, fluorescenční a CD spektroskopie pro studium struktury a funkce proteinů a nukleových kyselin. Radiometrické metody. Bioelektrochemie a biosenzory. Redox systémy. Výpočetní metody (homologní modelování a metody *ab initio*).

Okruhy otázek – volitelné předměty:

Anorganická chemie

Klasifikace prvků, prvky přechodné a nepřechodné, periodický systém a periodičita chemických vlastností. Horizontální a vertikální trendy. Elektronegativita, ionizační potenciál, iontové a kovalentní poloměry, teploty tání a varu. Krystalová struktura kovů, daltonidy a berthollidy, intersticiální sloučeniny a směsné krystaly. Systematické názvosloví anorganických sloučenin.

Vodík, jeho izotopy, typy binárních sloučenin vodíku.

Alkalické kovy a jejich sloučeniny. Alkalidy, komplexy s crownethery. Organolithné sloučeniny

Beryllium, hořčík a kovy alkalických zemin. Grignardovo činidlo. Podstata krasových jevů, tvrdost vody.

Bor, boridy, borany a vazba v nich, karborany a metalloborany. Halogenidy boru. Oxid boritý a kyselina boritá, boritany. Borazany a nitrid boru.

Hliník a jeho sloučeniny. Bayerův proces. Heroult-Hallova elektrolytická výroba hliníku. Amfoterní vlastnosti Al_2O_3 .

Uhlík a jeho allotropy. Anorganické sloučeniny uhlíku, freony, teflon. Organokovové sloučeniny. Karbonyly a jejich vazebné poměry.

Křemík a jeho anorganické sloučeniny, křemičitany a hliníkokřemičitany a jejich struktura, skla, siloxany a silazany.

Dusík a jeho anorganické sloučeniny. Výroba amoniaku a kyseliny dusičné.

Fosfor, jeho allotropy a anorganické sloučeniny, výroba kyseliny fosforečné, fosfazeny. Organofosfáty.

Kyslík, typy a struktura oxidů, voda, peroxid vodíku.

Síra a její anorganické sloučeniny. Výroba kyseliny sírové.

Selen, tellur, polonium, chalkogenidy, základní oxidy a kyseliny.

Halogeny, halogenovodíky a halogenidy, fluoridy kyslíku, oxidy ostatních halogenů, oxokyseliny, jejich soli, interhalogenové sloučeniny a ionty.

Vzácné plyny, výskyt, výroba, použití, sloučeniny xenonu a radonu.

Ostatní nepřechodné kovy: základní informace, výskyt, výroba, nejběžnější typy sloučenin: Ga, In, Tl; Ge, Sn, Pb; As, Sb, Bi.

Koordináční chemie, základní pojmy, tvary koordinačních polyedrů, typy ligandů, chelátový efekt, stabilita komplexů, izomerie v koordinačních sloučeninách. Vazba v koordinačních sloučeninách. Teorie ligandového pole, oktaedrické, tetraedrické, čtvercově planární a trigonálně bipyramidální komplexy. Vysokospinové a nízko-spinové komplexy, spektrochemická řada, 18elektronové pravidlo.

Základní informace o přechodných prvcích: Sc, Y, La; Ti, Zr, Hf; V, Nb, Ta; Cr, Mo, W; Mn, Tc, Re; skupina železa, lehké a těžké kovy platinové; Cu, Ag, Au; Zn, Cd, Hg.

Lanthanoidy a aktinoidy, uran a jeho sloučeniny, příprava a použití, přeměnové řady.

Organická chemie

Principy tvorby systematického názvosloví organických sloučenin.

Alkany a cykloalkany. Izomerie řetězová, konformace alkanů a cykloalkanů. Radikálové reakce jako typická reakce alkanů a jejich mechanismus.

Alkeny, geometrická isomerie u alkenů. Cahn, Ingold, Prelogova pravidla. Adiční reakce, mechanismus a stereochemie adičních reakcí. Polymerace.

Optická aktivita a symetrie molekul. Chiralita molekul, podmínky chiralit, zobrazování trojrozměrných molekul v rovině. Optická izomerie, specifická rotace, optická čistota, racemická směs. Určování absolutní konfigurace molekul. Mezoforma.

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

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. Adiční a oxidační reakce a jejich podmínky. Reakce na kondensovaných aromatických sloučeninách.

Halogenderiváty a jejich strukturní typy, reaktivita.

Hydroxysloučeniny-alkoholy a fenoly. Reaktivita hydroxylové skupiny, kyselost a vliv uhlíkatého zbytku na míru kyselosti. Oxidace alkoholů. Polyhydroxyderiváty.

Thioly a sulfidy. Produkty oxidace. Sulfonové kyseliny a jejich funkční deriváty (sulfochloridy, estery, sulfonamidy). Estery minerálních látek (sulfáty, nitráty, nitrity, fosfáty).

Aminosloučeniny. Základní chemické vlastnosti. Nitrosoučeniny, vliv nitroskupiny na uhlíkatý zbytek. Azosoučeniny, azoxysloučeniny a hydrazolátky. Nitrily a izokyanidy.

Organokovové sloučeniny.

Karboxylové sloučeniny. Charakterizace karboxylu, nukleofilní adice, reakce s kyslíkatými, dusíkatými a uhlíkatými nukleofily. Oxidace a redukce aldehydů a ketonů.

Karboxylové kyseliny, jejich struktura a chemické vlastnosti Funkční deriváty karboxylových kyselin (estery, halogenidy, anhydridy, amidy), jejich příprava, vlastnosti a využití v organické syntéze. Deriváty kyseliny uhličitě.

Heterocyklické sloučeniny. Elektronová struktura a vliv na chemické vlastnosti, srovnání jejich chemických vlastností.

Analytická chemie

Analytické reakce. Popis rovnováh. Redoxní rovnováhy, standardní a formální potenciál, redoxní disproportionace. Principy kvalitativní chemické analýzy.

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

Titrační metody. Výklad titračních křivek, vztah mezi inflexním a ekvivalenčním bodem, strmota a tlumivé oblasti křivek, titrační roztoky a primární standardy, indikace ekvivalenčního bodu, titrační chyby. Acidobazické titrace, acidobazické tlumivé roztoky. Komplexometrické titrace. Chelatometrie. Srážecí titrace. Redoxní titrace.

Hodnocení výsledků analýz. Statistika a základy SLP (GLP), analytický signál, kalibrační křivky, standardizace. Parametry analytické metody. Chyby a jejich vztah k parametrům analytických metod. Statistické vyhodnocení analytických výsledků. Referenční materiál, kruhový test. Lineární regrese.

Elektroanalytické metody. Potenciometrické metody. Indikační a referenční elektrody, iontově selektivní elektrody, skleněná elektroda. Měření pH. Potenciometrická indikace průběhu titrací a ekvivalenčního bodu, Granova linearizace titračních křivek. Konduktometrické metody. Elektrogravimetrie, coulometrie. Polarizační křivky, vylučovací proud, Faradayův proud. Elektrolýza při konstantním potenciálu a při konstantní intenzitě proudu. Elektrolytické dělení kovů. Coulometrie při konstantním potenciálu a při konstantním proudu. Coulometrické titrace. Voltamperometrie, polarografie. Polarografická analýza. Amperometrické, biamperometrické a bipotenciometrické titrace.

Optické analytické metody. Elektromagnetické záření, Bouguer-Lambert-Beerův zákon, příčiny absorpce a emise záření. Molekulová absorpční spektroskopie (UV, VIS, IR), atomová absorpční a emisní spektroskopie, luminiscenční metody,

Separacioní metody. Kapalinová extrakce. Extrakční rovnováhy v dvoufázovém systému. Analytické využití ionexů. Chromatografie na tenké vrstvě sorbentu. Analýza plynů. Plynová chromatografie, HLPC - vysokoúčinná kapalinová chromatografie, základy instrumentace, kvalitativní a kvantitativní charakteristiky, použití. Elektromigrační metody, zonální elektroforéza, elektroforéza na nosičích a izotachoforéza.

Základy analýzy organických sloučenin. Kvalitativní a kvantitativní charakteristika. Elementární analýza, analýza funkčních skupin, určování čistoty sloučenin, základy přístupu při určování struktury organických sloučenin. Stanovení látek ve složitějších směsích.

Literatura:

- Housecroft C. E., Sharpe A. *Anorganická chemie*, 1. vyd., VŠCHT Praha, 2014.
- Klikorka J., Hájek B., Votinský J. *Obecná a anorganická chemie*, 2. vyd., SNTL Praha, 1989.
- Atkins, P., de Paula J. *Fyzikální chemie*. 1. vyd., VŠCHT Praha, 2013.
- Kodíček M., Karpenko V. *Biofyzikální chemie*, Academia, 2013.
- Vodrážka Z. *Obecná a fyzikální chemie pro lékaře a biology*, Avicenum, ZN, Praha, 1972.
- 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., Academia Praha, 2007.