

## Obor Analytický chemik – manažer chemické laboratoře

Státní závěrečná zkouška sestává z obhajoby bakalářské práce a písemné zkoušky ze tří povinných předmětů (Obecná a fyzikální chemie, Analytická chemie, Analytický management) a jednoho povinně volitelného předmětu z výběru: Anorganická chemie, Organická chemie, Biochemie. 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 orbitaly, energie atomových orbitalů ve vodíkovém atomu. Periodicita elektronových konfigurací a periodicitu 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, aktivní 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 řády 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.

## 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,

Separální 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.

## Analytický management

Zajištění a kontrola kvality analytických výsledků (Quality assurance/quality control). Analytické metrologie a legislativa.

Základní pojmy analytické metrologie signálu a výsledku. Odhady a praktické použití metrologických charakteristik při uvádění analytických výsledků. Metrologické vlastnosti analytické metody a analytického systému, vývoj analytické metody, referenční materiály. Metoda plánování pokusů a základní principy optimalizace. Řízení kvality a akreditace laboratoře, validace.

Zákonem nebo nařízením oficiální agentury stanovená metoda (USEPA, European directive); referenční a normovaná metoda (ISO, CEN, DIN ...); modifikovaná metoda; rychlá metoda (screening); rutinní metoda; automatizovaná metoda.

Evaluace laboratoře; správná laboratorní praxe; systém akreditování; řada ISO 9000; akreditace výrobců CRM a RM; certifikace analytického chemika.

### **Okruhy otázek – volitelné předměty:**

#### Anorganická chemie

Klasifikace prvků, prvky přechodné a nepřechodné, periodický systém a periodicitu 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 metalborany. Halogenidy boru. Oxid boritý a kyselina boritá, boritany. Borazany a nitrid boru.

Hliník a jeho sloučeniny. Bayerův proces. Heroult-Halova 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.

Koordinační 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 nízkospinové 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. Nitrosloučeniny, vliv nitroskupiny na uhlíkatý zbytek. Azosloučeniny, azoxysloučeniny a hydrazolátky. Nitrily a izokyanidy.

Organokovové sloučeniny.

Karboxylové sloučeniny. Charakterizace karbonylu, 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.

## 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, stereoisomerie, 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.

#### 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.
- 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.