

Obor Analytický chemik – manažer chemické laboratoře

Státní závěrečná zkouška sestává z obhajoby bakalářské práce a písemné zkoušky ze tří povinných předmětů (Analytická chemie, Fyzikálně chemické základy analytických metod a Management) a jednoho povinně volitelného předmětu z výběru: Anorganická chemie, Organická chemie nebo 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:

Analytická chemie

I. Termodynamická rovnováha jako princip analytických metod

Gravimetrie

Gravimetrické postupy. Analytické reakce za vzniku sraženin, rozpustnost a součin rozpustnosti.

Analytické rovnovážné reakce

Protolytické reakce ve vodném prostředí, základy grafického popisu acidobazických rovnovah. acidobazické tlumivé roztoky. Komplexotvorné rovnováhy, popis komplexotvorných rovnovah.

Redoxní rovnováhy - popis redoxních reakcí, standardní a formální potenciál.

Titrace

Acidobazické titrace - výpočet pH ekvivalenčního bodu, indikátory ekvivalenčního bodu. Stanovení silných i slabých kyselin.

Komplexometrické titrace - chelatometrická titrace, EDTA, vliv podmíněné stability chelátů, pH při titraci, indikátory ekvivalenčního bodu. Srážecí titrace - argentometrické titrace, interpretace logaritmických diagramů při srážení AgCl, AgBr, AgI, Ag₂CrO₄, titrační křivky směsí Cl⁻, Br⁻, I⁻. Redoxní titrace - výpočet potenciálu ekvivalenčního bodu, redoxní soustavy, indikátory. Indikační a referentní elektrody, iontově selektivní elektrody (ISE). Skleněná elektroda. Měření pH.

Potenciometrická a konduktometrická indikace průběhu titrací a ekvivalenčního bodu pro acidobazické, redoxní, srážecí, komplexometrické titrace s potenciometrickou indikací. Granova linearizace titračních křivek.

II. Elektřina jako princip analytických metod – elektroanalytické metody

Elektrogravimetrie, coulometrie. Polarizační křivky, vylučovací proud, Faradayův proud. Coulometrie při konstantním potenciálu a při konstantním proudu. Coulometrické titrace. Voltamperometrie, polarografie. Polarografie.

III. Optické analytické metody pro kvantitativní analýzu

Elektromagnetické záření, Bouguer-Lambert-Beerův zákon, příčiny absorpce a emise záření. Molekulová absorpční spektroskopie (UV, VIS, IR). Teorie, instrumentace, kvalitativní a kvantitativní aspekty, aplikace.

Atomová spektrometrie. Atomová absorpční spektrometrie, plamenová atomizace, elektrotermická atomizace, emisní spektrální analýza, atomová emisní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem.

Refraktometrie, interferometrie, polarimetrie a spektropolarimetrie - principy, použití.

IV. Metody pro strukturní analýzu organických molekul. Analýza biomolekul

Elementární analýza, analýza funkčních skupin, základy přístupu při určování struktury organických sloučenin. Infračervená spektroskopie. Instrumentace a pracovní technika.

Nukleární magnetická rezonance - princip, aktivní jádra – podmínka rezonance, instrumentace. Charakteristiky ¹³C NMR spekter.

Analytická hmotnostní spektrometrie - fyzikální zákony (elektřina, magnetismus), které jsou základem MS. Princip základních ionizačních metod (EI, CI, ICP, ESI, MALDI), hmotnostních analyzátorů (magnetový sektor, kvadrupólový filtr, iontová past, TOF) a základní aplikace MS.

Kvantitativní analýza biomolekul na základě chemické specifity:

Preanalytická fáze. Imunologické reakce - Body-antibody, gen-antigen. Základní principy, přehled moderních metod využívaných v klinické diagnostice (RIA, EIA, ELISA, FIA).

Chemická kinetika jako princip kvantitativní analýzy:

Kinetika chemické reakce, řád reakce, Kinetické metody pro analytické stanovení. Katalytické reakce. Enzymy jako katalyzátory – rovnice Michaelis-Mentenové.

V. Analytická separace - separační metody

Kapalinová extrakce. Extrakční rovnováhy v dvoufázovém systému. Extrakce solvátů, ionizovaných a neionizovaných sloučenin. Analytické využití ionexů.

Chromatografie na tenké vrstvě sorbentu (tenkovrstvá, papírová), použití.

Kapalinová chromatografie, teorie, základy instrumentace, kvalitativní a kvantitativní charakteristiky, analytické použití.

Plynová chromatografie, teorie, základy instrumentace, kvalitativní a kvantitativní charakteristiky, příklady analytické použití.

Elektromigrační metody – elektroforéza v nosiči na ploše. Kapilární elektroforéza a izotachoforéza. Základy instrumentace, kvalitativní a kvantitativní charakteristiky, analytické použití. 2D-elektroforéza.

VI. Prvková analýza

Kvalitativní analýza anorganických iontů

Principy kvalitativní chemické analýzy. Skupinová a selektivní činidla, původ chemické selektivity, maskovací činidla.

Stopová analýza

Stopový obsah, laboratoř pro stopovou analýzu. Kontaminace a ztráty analytu během analytického postupu. Rozklady anorganických vzorků, rozklady v autoklávech.

VII. Vstup a výstup chemické analýzy. Úprava vzorku a interpretace analytického signálu. Hodnocení výsledků analýz

Odběr a uchování vzorku; příprava vzorku k analýze. Statistika a základy SLP (GLP), analytický signál, kalibrační křivky a jejich vyhodnocování, standardizace. Parametry analytické metody (mez detekce a stanovitelnosti, citlivost, robustnost, přesnost, správnost, nejistoty). Chyby a jejich vztah k parametrům analytických metod. Statistické vyhodnocení analytických výsledků. Kruhový test. Základy chemometrických přístupů a metod. Lineární regrese. ANOVA.

Fyzikálně chemické základy analytických metod

Typy kovalentních vazeb. Řád vazby. Iontové sloučeniny a iontová vazba. Kovová vazba. Slabé interakce mezi molekulami, vazba vodíkovým můstkem, van der Waalsovy síly.

Chemická termodynamika. Tepelná rovnováha, teplota, tlak, nultá věta. První věta, vnitřní energie, teplo, práce. Entalpie, tepelné kapacity. Druhá věta. Entropie. Gibbsova funkce, závislost Gibbsovy funkce na teplotě, tlaku a složení. Chemický potenciál. Třetí věta. Chemické rovnováhy. Rovnovážná konstanta a její závislost na tlaku a na teplotě. Le Chatelierův princip.

Elektrolytická disociace iontových látek, Vodivost iontů, silné a slabé elektrolyty, iontová síla roztoku. Galvanické a elektrolytické články. Standardní potenciál elektrody. Druhy elektrod. Oxidace a redukce. Elektroda prvního a druhého druhu, Nernstova rovnice, vodíková elektroda. Oxidoredukční elektroda. Elektrolýza roztavených solí a vodných roztoků, anodické a katodické reakce, Faradayův zákon.

Chemická kinetika. Rychlost chemických reakcí, rychlostní zákon, rychlostní konstanta a řády reakcí. Srážková teorie. Teorie aktivovaného komplexu. Reakční koordináta, aktivací energie, vliv teploty na reakční rychlost. Katalýza: katalyzátory, katalyzované reakce, homogenní a heterogenní katalýza.

Elektrické, magnetické a optické vlastnosti molekul. Dipólový moment, index lomu, refrakce. Optická aktivita molekul, Cottonův efekt, optická rotační disperze, cirkulární dichroismus. Interakce záření s hmotou. Spektroskopie Mössbauerova, fotoelektronová, elektronová, molekulová (IČ, Ramanova) spektroskopie, rotační a vibrační spektra, EPR a NMR. Principy jejich měření.

Management

Analytický (odborný) 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.

Firemní management

Management - základní poznatky o procesu delegování, plánování, rozhodování, ovlivňování a kontrolování. Organizování a tvorba organizačních struktur.

Hierarchie právních norem. Právní vztah, subjektivní právo a povinnost. Subjekty práva, právní subjektivita. Základy právní úpravy podnikání (obecné podmínky podnikání, podnikání zahraničních osob, živnosti, profesní samospráva). Právní odpovědnost a ručení manažera.

Podnik a podnikové hospodářství. Základní pojmy podnikové ekonomiky - podnikové výrobní faktory, právní formy podnikání, sdružování podniků a volba stanoviště podniku.

Základní zdroje finančních informací o podniku - základní účetní dokumentace (výsledovka a rozvaha), čistý pracovní kapitál, strategie financování podniku. Kalkulace nákladů. Hodnocení efektivity investic (statické a dynamické metody).

Literatura:

- Sommer L. *Základy analytické chemie I*, VUTium Brno, 1998.
- Sommer L. a kol. *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. FortWorth: Saunders College Publishing, 1999.
- Skoog D. A., Holler, J. F., Nieman T. A.: *Principles of instrumental analysis*. 5th ed. Philadelphia: Saunders College Publishing, 1998.
- Harris D. C.: *Quantitative chemical analysis*. 4th ed. New York: W.H. Freeman, 1995.
- Volka K.: *Analytická chemie II*. VŠCHT Praha, 1995.
- Zýka J. a kol.: *Analytická příručka. Díl I a II*. SNTL Praha, 1988.
- Atkins, P., de Paula J. *Fyzikální chemie*. 1. vyd., VŠCHT Praha, 2013.
- Ševčík, J.G.K.: *Metodologie měření v analytické chemii*. Karolinum Praha, 1996.
- ed. Suchánek, M.: *Kvalimetrie 1-8*, EURACHEM-ČR, Praha 1992-1999.
- Sylaby Distanční studijní opory (DSO) - ESF MU v Brně.
- Veber, J. *Management : základy, prosperita, globalizace*. Vyd. 1. Praha: Management Press, 2000. 700 s. ISBN 80-7261-029-5.
- Kučera, R. *Základy práva*. 1. vyd. Brno : MU, 2002, ISBN 80-210-2940-4.
- Synek, M. *Podniková ekonomika*. Vyd. 1. Praha : C.H. Beck, 1999.
- Kalouda F.: *Základy firemních financí*. MU 2004, ISBN 80-210-3584-6

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 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.

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 trojně 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, 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.

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.
- Toužín J. *Stručný přehled chemie prvků*, Skripta MU Brno, 2001.
- Mc Murry J. *Organická chemie*, překlad 6. vydání, VUTium Brno a VŠCHT Praha, 2007.
- Vodrážka Z. *Biochemie*, 2. vyd., Academia Praha, 2007.