

Studijní plán: **Analytický chemik – manažer chemické laboratoře**

Státní závěrečná zkouška sestává z prezentace závěrečného projektu a písemné zkoušky ze tří povinných předmětů (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. Nezbytnou znalostí jsou základní pojmy a výpočty z obecné chemie (látkové množství, stechiometrické výpočty, koncentrace atd.). Okruhy a příklady otázek pro jednotlivé předměty jsou uvedeny níže. Při písemné zkoušce je povolena kalkulačka.

Okruhy otázek – povinné předměty:

Fyzikální chemie

Použití stavové rovnice ideálního plynu a výpočet parciálních tlaků. (Atkins, kap. 1)

První termodynamický zákon. Výpočet práce při výrobě plynu. Entalpie: definice, význam, vztah mezi ΔH a ΔU . Izobarická a izochorická tepelná kapacita. Použití Hessova zákona: kombinování reakčních entalpií. (Atkins, kap. 2)

Druhý termodynamický zákon. Termodynamická definice entropie a výpočet změny entropie pro izotermickou expanzi ideálního plynu. Clausiova nerovnost. Definice Helmholtzovy a Gibbsovy energie a na nich založená kritéria samovolného děje. Výpočet maximální práce a maximální neobjemové práce reakce. Výpočet standardní Gibbsovy energie reakce a posouzení spontánnosti reakce. Fundamentální rovnice chemické termodynamiky. Závislost Gibbsovy energie na tlaku pro ideální plyn. (Atkins, kap. 3)

Chemický potenciál čisté látky. Kritérium fázové rovnováhy. Fázový diagram čisté látky. Fázové pravidlo. Závislost chemického potenciálu na T a p . (Atkins, kap. 4)

Definice chemického potenciálu a fundamentální rovnice chemické termodynamiky pro směsi. Závislost chemického potenciálu ideálního plynu na tlaku. Raoultův zákon a Henryho zákon. Aktivita rozpouštědla: definice, výpočet z parciálního tlaku, aktivitní koeficient. Aktivita rozpuštěné látky. (Atkins, kap. 5)

Reakční Gibbsova energie a podmínka rovnováhy. Příklad obecné reakce: reakční Gibbsova energie v libovolném stádiu reakce, způsob výpočtu standardní reakční Gibbsovy energie, definice reakčního kvocientu. Definice a výpočet rovnovážné konstanty. Le Chatelierův princip: Odezva rovnováhy na změny tlaku a teploty. Rozepsání oxidačně-redukční reakce na poloreakce. Vztah rovnovážného napětí článku k reakční Gibbsově energii. Nernstova rovnice a její využití k výpočtu napětí článku pro libovolné aktivity reaktantů a produktů. Interpretace řady napětí kovů. Určování rovnovážných konstant ze standardního napětí článku. (Atkins, kap. 6)

Výpočet spektrálních linií vodíkového atomu. Specifikace orbitalů: kvantová čísla, jejich význam a možné hodnoty. Označení slupek a podslopek. Výstavbový princip a Hundovo pravidlo. (Atkins, kap. 9)

Orbitaly sigma a pí. Elektronová struktura homonukleárních biatomických molekul. Řád vazby. Posouzení relativní síly vazby v molekulách a iontech. (Atkins, kap. 10)

Definice a použití pojmu rychlost reakce. Odečtení okamžité rychlosti reakce z grafu časové závislosti koncentrace. Řád reakce. Reakce prvního řádu: rychlostní rovnice v diferenciálním a integrovaném tvaru,

poločas reakce a jeho grafické i výpočetní určení. Arrheniova rovnice a vztah aktivační energie k závislosti reakční rychlosti na teplotě. (Atkins, kap. 21)

Analytická chemie

Rozklady vzorků na mokré cestě, rozklady vzorků na suché cestě. Principy kvalitativní chemické analýzy.

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

Titrační metody. Popis rovnováh. Protolytické, komplexotvorné a srážecí rovnováhy. Redoxní rovnováhy, standardní a formální potenciál. Výklad titračních křivek, titrační roztoky a primární standardy, indikace ekvivalenčního bodu. Acidobazické titrace, acidobazické tlumivé roztoky. Komplexometrické titrace, chelatometrie. Srážecí titrace. Redoxní titrace.

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, Faradayovy zákony. Coulometrie při konstantním potenciálu a při konstantním proudu. Voltametrie, polarografie. Polarografická analýza.

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. Refraktometrie, polarimetrie. Hmotnostní spektrometrie.

Separační metody. Kapalinová extrakce. Analytické využití ionexů. Chromatografie na tenké vrstvě sorbentu. Plynová chromatografie a HLPC (vysokoúčinná kapalinová chromatografie) – instrumentace, kvalitativní a kvantitativní charakteristiky, použití. Elektromigrační metody, zónová elektroforéza, izotachoforéza.

Hodnocení výsledků analýz. Analytický signál, standardizace, kalibrační křivka. Parametry analytické metody. Chyby a jejich vztah k parametrům analytických metod. Statistické vyhodnocování analytických výsledků.

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. Ušlechtilé a neušlechtilé kovy. Krystalová struktura kovů a základních iontových sloučenin (NaCl, CsCl, ZnS, CaF₂). Daltonidy a berthollidy, intersticiální sloučeniny. Systematické názvosloví anorganických sloučenin. Model VSEPR a tvary molekul.

Vodík, jeho izotopy, binární sloučeniny vodíku.

Alkalické kovy a jejich sloučeniny. Výroba hydroxidu sodného a sody. Organolithné sloučeniny.

Beryllium, hořčík a kovy alkalických zemin. Grignardova činidla. Podstata krasových jevů, tvrdost vody.

Bor, borany a elektronově deficitní vazba. Halogenidy boru. Oxid boritý a kyselina boritá.

Hliník, jeho halogenidy a oxo/hydroxo-sloučeniny. Bayerův proces a Heroultova-Hallova elektrolytická výroba hliníku. Amfoterní vlastnosti hliníku a jeho sloučenin.

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, (poly)siloxany.

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

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

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

Síra a její anorganické sloučeniny. Výroba kyseliny sírové.

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

Vzácné plyny, sloučeniny xenonu.

Těžší nepřechodné prvky 13.–16. skupiny: výskyt, výroba, využití (polovodiče, nízkotající slitiny, olověné akumulátory), nejběžnější halogenidy a oxosloučeniny. Inertní elektronový pár.

Přechodné prvky: základní metody výroby a čištění – výroba oceli, Krollův proces, van Arkelova-de Boerova metoda, karbonylový (Mondův) proces, aluminotermie. Využití kovů, jejich slitin a sloučenin (stavební a konstrukční materiály, elektrotechnika, katalyzátory, lékařství). Důležité halogenidy a oxosloučeniny prvků 4. periody (Sc–Zn).

Koordinační chemie, základní pojmy, vazba v koordinačních sloučeninách, tvary koordinačních polyedrů, typy ligandů, tvrdé a měkké Lewisovy kyseliny a zásady, stabilita komplexů, izomerie v koordinačních sloučeninách. Názvosloví koordinačních sloučenin. Ligandové pole v oktaedrických komplexech – vysokospinové a nízkospinové komplexy, spektrochemická řada. Důležité koordinační sloučeniny (karbonylové komplexy, ferrocen, *cis*-platina, metaloporfyriny).

Lanthanoidy a aktinoidy, uran a jeho sloučeniny.

Organická chemie

Principy tvorby systematických názvů organických sloučenin.

Vazebné poměry a hybridizace. Konjugace. Odvozování rezonančních (mezomerních) vzorců a jejich interpretace. Indukční a mezomerní efekt.

Kyselost a bazicita organických látek. Faktory ovlivňující tyto vlastnosti. Hodnoty pK_a a pK_b důležitých funkčních skupin.

Konformace alkanů, cykloalkanů a jejich derivátů. Metody zobrazování trojrozměrného uspořádání molekul. Chiralita, vlastnosti a dělení enantiomerů. Typy izomerů. Popis (absolutní) konfigurace stereogenního centra.

Alkany a cykloalkany. Radikálové reakce jako typická reakce alkanů a jejich mechanismus.

Alkeny a alkyny. Adiční reakce, mechanismus a stereochemie adičních reakcí. Konjugované polyeny, vlastnosti a reakce (1,2- a 1,4-adice, pericyklické reakce). Kyselost terminálních alkynů a její využití.

Aromaticita. Benzoidní a nebenzoidní aromáty. Vlastnosti aromatických sloučenin, mechanismus elektrofilní a nukleofilní aromatické substituce. Vliv substituentů na rychlost a selektivitu S_EAr . Oxidace arenů a jejich alkylovaných derivátů.

Halogenderiváty. Metody přípravy a reaktivita (mechanismy S_N1 , S_N2 , E1, E2).

Alkoholy a fenoly. Příprava a reaktivita alkoholů. Metody oxidace alkoholů. Příprava etherů. Příprava epoxidů a jejich reakce s nukleofily.

Aminy. Příprava a reakce aminů a nitrosloučenin. Diazoniové soli a jejich využití.

Organokovové sloučeniny, metody přípravy a reakce s kyselinami a elektrofily.

Karboxylové sloučeniny. Charakterizace karbonylu, nukleofilní adice, mechanismy reakce s kyslíkatými, dusíkatými a uhlíkatými nukleofily. Aldolové reakce. Oxidace a redukce aldehydů a ketonů. Reakce enolizovatelných karboxylových sloučenin s elektrofily. Michaelova adice.

Karboxylové kyseliny, jejich struktura a chemické vlastnosti. Funkční deriváty karboxylových kyselin (estery, halogenidy, anhydridy, amidy), jejich příprava, vlastnosti, reaktivita a využití v organické syntéze. Nukleofilní acylová substituce. Reakce funkčních derivátů s organokovy a komplexními hydridovými aniony. Nitrily.

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

Biochemie

Aminokyseliny, jejich vzorce, acidobazické rovnováhy, izoelektrický bod.

Peptidy, peptidová vazba, primární, sekundární, terciární, kvarterní 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 (srážení, ionexová a afinitní chromatografie, gelová filtrace, elektroforéza v SDS, izoelektrická fokusace a 2D elektroforéza).

Biochemie hemoglobinu. Přenos kyslíku a jeho regulace.

Sacharidy. Pentosy, hexosy, aldosa, ketosa. Glykosidy, glykosidová vazba a její vlastnosti, disacharidy, homopolysacharidy (škrob, celulóza, glykogen, chitin), heteropolysacharidy, proteoglykany.

Lipidy, mastné kyseliny, glycerofosfolipidy, plasmalogeny, sfingolipidy, steroidy, lipoproteiny.

Nukleové kyseliny. Báze, DNA, RNA, typy šroubovice DNA, superhelikální struktura, vazby stabilizující sekundární strukturu DNA. Replikace, transkripce, translace. Základy genových manipulací. Sekvence nukleových kyselin.

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: vliv pH, zymogeny, kovalentní modifikace (fosforylace, adenylylace, disulfidy).

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, lokalizace a komponenty, světelná fáze, Calvinův cyklus.

Mechanismus svalového stahu, biochemie vidění, přenos nervového vzruchu.

Imunochemie. Protilátky a antigeny. Buněčná imunita. Imunoanalytické postupy, ELISA.

Hormony. Mechanismu funkce některých hormonů (adrenalin, glukagon, prostaglandiny, steroidní hormony, thyroxin, inzulin, rostlinné hormony). Základy buněčné signalizace, druhý posel. Struktura a funkce G-proteinů. Xenobiochemie, cytochrom P450.

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*, MU Brno, 2001.
- McMurry J. *Organická chemie*, překlad 8. vyd., VŠCHT Praha, 2015.
- Svoboda J. *Organická chemie I*. 1. vyd., VŠCHT Praha, 2005.
- Sommer L. *Základy analytické chemie I*, VUTium Brno, 1998.
- Sommer L. a kol. *Základy analytické chemie II*, VUTium Brno, 2000.
- Skoog Douglas A., West Donald M., Holler F. James a Crouch Stanley R. *Analytická chemie*. 1. vyd., VŠCHT Praha, 2019.
- Zýka J. *Analytická příručka. Díl I*, 4. upr. vyd., SNTL Praha, 1988.
- Zýka J. *Analytická příručka. Díl II*, 4. upr. vyd., SNTL Praha, 1988.
- Vodrážka Z. *Biochemie*, 2. vyd., Academia Praha, 2007.
- Voet D., Voet J. G. *Biochemie*, 1. vyd., Victoria Publishing Praha, 1995.

Příklady testových otázek:

Fyzikální chemie (uzavřené otázky s jednou správnou odpovědí)

- 1) Samovolný děj v uzavřeném systému probíhá jako důsledek tendence
 - a) poklesu entropie systému
 - b) poklesu Gibbsovy energie systému
 - c) poklesu celkové entropie systému a okolí
 - d) snižování energie systému

- 2) Jaká je standardní spalná entalpie $\Delta_c H^0$ glukózy, je-li $\Delta_f H^0(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6, \text{s}) = -1268 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta_f H^0(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = -285,8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ a $\Delta_f H^0(\text{CO}_2, \text{g}) = -393,5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$?
$$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 (\text{s}) + 6 \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow 6 \text{CO}_2 (\text{g}) + 6 \text{H}_2\text{O} (\text{l})$$
 - a) $+2808 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
 - b) $-2808 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
 - c) $-5344 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
 - d) $-7059 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

- 3) Boylova teplota je teplota
 - a) nad níž není možno plyn zkapalnit
 - b) při níž je nulový druhý viriální koeficient
 - c) při níž platí Boyleův zákon
 - d) nad níž jsou konstanty Van der Waalsovy rovnice nulové

Analytická chemie (uzavřené otázky s jednou správnou odpovědí)

- 1) Která z instrumentálních technik patří mezi metody absolutní?
 - a) coulometrie
 - b) UV/VIS molekulová absorpční spektroskopie
 - c) luminiscenční emisní spektroskopie
 - d) kapilární zónová elektroforéza

- 2) Absorbance roztoku absorbující látky je 0,5. Transmittance (ve stejné kyvetě při stejné vlnové délce) roztoku této látky o dvojnásobné látkové koncentraci je:
 - a) 20 %
 - b) 10 %
 - c) 1 %
 - d) 50 %

- 3) 25 cm³ roztoku H₂O₂ bylo titrováno v kyselém prostředí roztokem KMnO₄ o koncentraci 0,020 mol·dm⁻³. Jaká byla koncentrace H₂O₂, jestliže spotřeba roztoku KMnO₄ byla 0,015 dm³?
 - a) 0,030 mol·dm⁻³
 - b) 0,012 mol·dm⁻³
 - c) 0,060 mol·dm⁻³
 - d) 2,4 mmol·dm⁻³

Analytický management (uzavřené otázky s jednou správnou odpovědí)

1) Co jsou normy řady ISO?

- a) Jsou normy kvality vypracované Mezinárodní organizací pro standardizaci platné v Evropské unii
- b) Jsou normy kvality sestavené technickými komisemi a vědeckými instituty v členském státu EU
- c) Jsou to normy, které může ale nemusí přijmout všechny členské státy EU
- d) Jsou to normy kvality pro různé typy výrobků a služeb, které musí povinně dodržovat všechny členské státy EU

2) Co je nejistota měření?

- a) Nejistota měření je parametr charakterizující rozptyl hodnot množství (výsledků) přiřazených měřenému analytu
- b) Je to jen nejistota zjištěná z literárních dat
- c) Je to jen nejistota vzniklá ve výsledků měření analytu danou metodou
- d) Je to pochybnost o správnosti výsledku měření

3) Z následujících tvrzení platí:

- a) Každá verifikace je validací.
- b) Systematickou chybu lze zmenšit opakovaným měřením.
- c) Pravdivost měření je těsnost shody mezi naměřenou hodnotou veličiny a pravou hodnotou měřené veličiny.
- d) Chyby odběru vzorků nelze vyhodnocovat ani ovlivňovat pomocí referenčních materiálů.

Anorganická chemie (uzavřené otázky s jednou správnou odpovědí)

1) Vodík:

- a) hoří, ale hoření nepodporuje
- b) nehoří ani nepodporuje hoření
- c) má ve své molekule atomy spojené velmi pevnou vazbou, proto patří mezi inertní plyny
- d) nehoří, ale hoření podporuje

2) Smísením hydridu sodného s vodou vzniká

- a) kyselý roztok
- b) vodík
- c) sodík
- d) kyslík

3) Kobaltitý kation (elektronová konfigurace $3d^6 4s^0$) v oktaedrickém poli silně štěpících ligandů CN^-

- a) vykazuje nízkospinové uspořádání
- b) má paramagnetické vlastnosti
- c) má v základním stavu nepárové d-elektrony
- d) je Lewisovou zásadou

Biochemie (uzavřené otázky s jednou správnou odpovědí)

1) FAD je koenzymem

- a) oxidoreduktáz
- b) transferáz
- c) hydroláz
- d) isomeráz

2) V jaké formě se aminokyselina dostává na správné místo na mRNA (kodon) při syntéze bílkovin?

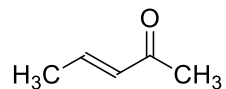
- a) volná
- b) vázaná na AMP
- c) vázaná na CoA
- d) vázaná na tRNA

3) Které sloučeniny vznikající ve světlé fázi jsou nezbytné pro asimilaci CO_2 v temné fázi fotosyntézy?

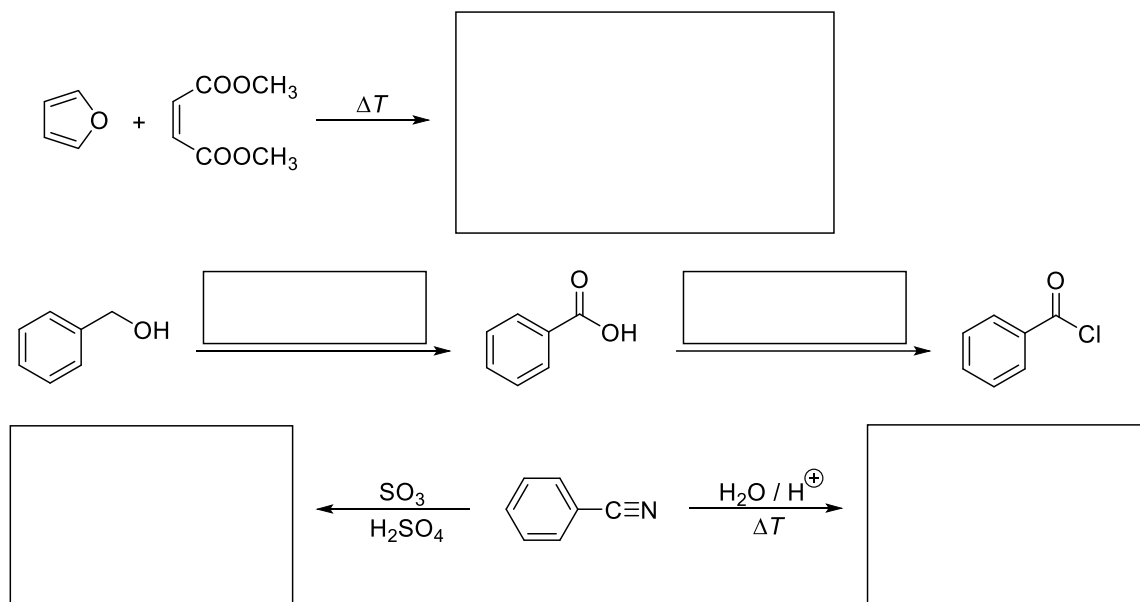
- a) NADH a NADPH
- b) ATP a laktát
- c) ATP a NADPH
- d) NADH a pyruvát

Organická chemie (otevřené otázky)

- 1) V následující molekule označte atom(y), které budou přednostně napadány nukleofilem.



- 2) Do následujících reakčních schémat doplňte příslušné reaktanty, činidla nebo hlavní produkty reakcí včetně správné konfigurace.



- 3) Napište podrobný mechanismus a konečné produkty hydrolýzy ethyl-acetátu v bazickém prostředí.