

Specializace **Anorganická chemie**

Státní závěrečná zkouška sestává ze tří povinných předmětů, přičemž první z nich je povinný pro všechny specializace studijního programu Chemie.

- Metody chemického výzkumu
- Systematická anorganická chemie
- Koordinační a 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:

1. Metody chemického výzkumu

Metody založené na absorpci gama záření. Moessbauerova spektroskopie, bezodrazová jaderná rezonanční absorpce, isotopový posun, kvadrupolové štěpení, magnetické dipolové štěpení. Metody založené na absorpci elektronů. Hmotnostní spektrometrie, metody ionizace nárazem elektronů, chemická ionizace, elektropray, hmotnostní separace a detekce iontů, hmotnostní spektrum, fragmentace iontů, metastabilní ionty. Metody založené na difrakci elektronů, neutronů a rentgenového záření (difrakční metody). Symetrie krystalů, trojrozměrné mřížky a krystalografické soustavy, primitivní buňka, 14 Bravaisových mřížek, 32 krystalografických tříd, trojrozměrné prostorové grupy, difrakce rentgenového záření, difrakce na souboru rovin, přímá a reciproká mřížka, Ewaldova konstrukce, interference, Laueho a Braggova metoda. Zdroje a detektory rentgenového záření, difraktometry. Fázový problém, Pattersonovské a přímé metody, upřesňování modelu, R-faktory, metoda nejmenších čtverců. Krystalografické databáze. Metody založené na absorpci rentgenového a ultrafialového záření a na absorpci elektronů (fotoelektronová XPS, ESCA a Augerova spektroskopie, rentgenová fluorescenční analýza). Metody založené na absorpci ultrafialového a viditelného záření (elektronová spektroskopie). Absorpce UV a VIS záření, Franckův-Condonův princip, luminiscence, fluorescence, fosforescence, Jablonského diagram, vyhasínání luminiscence, typy přechodů, typy excitace, instrumentace pro fluorescenční spektrometrii, 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. Metody založené na absorpci infračerveného a mikrovlnného záření (spektra rotační, vibrační a rotačně-vibrační). Symetrické vlastnosti molekul, prvky a operace symetrie, základní pojmy teorie grup. 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. Interpretace vibračních spekter, empirická pravidla, charakteristické frekvence, princip normální souřadnicové analýzy. Mikrovlnná spektroskopie. Molekuly v elektrickém poli světelné vlny (Rayleighův a Ramanův rozptyl, Ramanova spektroskopie, anisotropie polarizovatelnosti, depolarizace, Stokesovy a anti-Stokesovy přechody). Molekuly v elektrickém poli (permitivita dielektrika, polarizovatelnost, indukovaná a orientační polarizace, indukovaný a permanentní elektrický dipólový moment, měření dipolových momentů, mezimolekulární interakce). Přechod světla látkami (lom světla, index lomu a molární refrakce, 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 (magnetická indukce, magnetizace, permanentní magnetický dipólový moment, anizotropie magnetické susceptibility, diamagnetika, paramagnetika a ferromagnetika, Curieův a Curie-Weissův zákon, spin-orbitální interakce, jednomolekulové magnety). Metody založené na absorpci mikrovlnného a radiofrekvenčního záření látkami v magnetickém poli (elektronová paramagnetická a nukleární magnetická rezonanční spektroskopie). EPR spektroskopie, podmínka resonance, Landého g-faktor, hyperjemné štěpení. NMR 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 T_1 a T_2 , relaxační mechanismy, dynamická NMR spektroskopie, chemická výměna. Metody s indukčně vázaným plazmatem. Atomizace, ionizace,

stimulovaná emise, instrumentace, laserová ablace, spojení ICP-MS. Metody termické analýzy. Základní metody termické analýzy (TGA, DTA, DSC, simultánní termická analýza). Rozšířená termická analýza (TG-FTIR-MS). Tepelné zpracování materiálů, křivky chladnutí, kalorimetrické metody stanovení tepla fázových přeměn a tepelné kapacity materiálů. Fázové přeměny 1. a 2. řádu. Separační metody. Plynová chromatografie (instrumentace, způsoby dávkování vzorku, kolony, složení stacionárních fází, typy detektorů, retenční charakteristiky, retenční čas, redukovaný a mrtvý čas, kapacitní poměr), van Deemterova rovnice, kvalitativní a kvantitativní analýza, spojení GC-MS. Kapalinová chromatografie, princip separace, kolonová chromatografie, vysokoúčinná kapalinová chromatografie. Instrumentace, částicové a monolitické stacionární fáze, separační mechanismy, charakterizace kolon a retenční charakteristiky (retenční čas, retenční faktor, rozlišení, účinnost, selektivita). Kapilární elektroforéza (elektroforéza, elektroosmóza, elektroforetická pohyblivost, elektroforetický tok, pufr, instrumentace, účinnost separace, izotachoforéza, Kohlrauschova regulační funkce, samozaostřovací efekt, spojení CE-MS). Elektroanalytické metody. Redox, elektroda a elektrodový potenciál, Fermiho energie, elektrochemický článek, potenciometrie, ISE a pH elektroda, polarizace elektrody, přepětí. Potenciostatické/galvanostatické techniky, stacionární a nestacionární voltametrie, metody založené na úplné elektrolýze, senzor, biosenzor, nanosenzor.

Literatura:

- Atkins, P. W. *Physical Chemistry*. 6th ed. Oxford University Press, 1998. 1014 s. ISBN 0-19-850101-3.
- Atkins, P. W., de Paula, J. *Fyzikální chemie*. Vyd. 1. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 2013. 944 s. ISBN 9788070808306.
- Rankin, D. W. H., Mitzel, N., Morrison, C. *Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry*. Wiley, 2013. ISBN: 978-0-470-97278-6
- Bruce, D. W., O'Hare, D., Walton, R. I. *Local Structural Characterisation*. John Wiley & Sons, 2014. ISBN: 1-118-68192-4
- Bruce, D. W., O'Hare, D., Walton, R. I. *Structure from Diffraction Methods*. John Wiley & Sons, 2014. ISBN:9781119953227
- Bruce, D. W., O'Hare, D., Walton, R. I. *Multi Length-Scale Characterisation*. John Wiley & Sons, 2014. ISBN-13: 978-1119953197
- Nakamoto, K. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Applications in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry*. John Wiley & Sons, 2009. ISBN 0470405872.
- Colthup, N. B., L. H. Daly, S. E. Wiberley. *Introduction to infrared and Raman spectroscopy*. Third edition. San Diego: Academic Press, 1990. ISBN 978-0121825546.
- Snyder, L. R., Kirkland, J. J., Dolan, J. W. *Introduction to Modern Liquid Chromatography*. John Wiley & Sons, 2009.
- Kalous, V. a kol. *Metody chemického výzkumu*. 1. vyd. Praha: SNTL, 1987.
- Kratochvíl, B., Jenšovský, L. *Úvod do krystalochemie*. 1. vyd. Praha: SNTL, 1987.
- Holba, Vladislav. *Fyzikálno-chemické vlastnosti atómov a molekúl*. 1. vyd. Bratislava: Slovenské pedagogické nakladateľstvo, 1980.
- Exner, Otto. *Struktura a fyzikální vlastnosti organických sloučenin*. 1. vyd. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1985.
- Barker, J. *Mass spectrometry: analytical chemistry by open learning*. Edited by David J. Ando. 2nd ed. Chichester: John Wiley & Sons, 1998. ISBN 0-471-96764-5.

- Toužín, J., Černík, M. *Vibrační spektroskopie molekul a krystalů*. Praha, Státní pedagogické nakladatelství, 1980.
- Ebsworth, E. A. V., Rankin, D. W. H., Cradock, S. *Structural methods in inorganic chemistry*. 2nd ed., Boca Raton, Fla. CRC Press, 1991.
- Gaisford, S., Kett, V. & Haines, P. (Eds.) *Principles Of Thermal Analysis And Calorimetry*. RSC, 2016. 2nd ed., ISBN 13: 9781782620518, ISBN 10: 1782620516
- Skoog, D. A., *Analytická chemie*. VŠCHT, 2019, ISBN 978-80-7592-043-0
- Wang, J. *Analytical Electrochemistry*. 2nd ed. Wiley-VCH Publishers, 2000. ISBN 0-471-28272-3.
- Scholtz, F. *Electroanalytical Methods*. 2nd ed. Springer Heidelberg, 2010. ISBN: 978-3-642-02914-1.
- Barek J., Štulík K., Opekar F. *Elektroanalytická chemie*. UK Praha, 2005. ISBN 80-246-1146-5.
- Foret, F., Křivánková, L., Boček, P. *Capillary Zone Electrophoresis*. VCH, Weinheim, Germany, 1993.

2. Systematická anorganická chemie

Elektronová struktura atomů a iontů, atomové orbitály, kovalentní chemická vazba. Valenčně-vazebná teorie. Teorie molekulových orbitalů. Elektronegativita. Tvar a geometrie molekul nepřechodných prvků, model VSEPR. Izomerie chemických sloučenin, strukturální 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, struktura anorganických polymerů, geometrie polyedrických molekul, struktura boranů, klastery.

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 chalkogenů, 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 strukturální typy. Beryllium, 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, Wadeho pravidla. 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 fullerenů a jejich chemická reaktivita. Endohedrálční sloučeniny fullerenů, uhlíkové nanotrubičky. Chemické vlastnosti grafitu. Interkalace a interkaláty grafitu. Diamant, příprava monokrystalů, chemie vysokých tlaků, diamantová cela, transportní reakce v plynné fázi.

Křemík, germanium, cín, olovo. Elektronová struktura pevných látek, pásová teorie, kovy, polovodiče a izolanty. Elektrické, mechanické, termické, optické, a magnetické vlastnosti pevných látek. Kovová, iontová a kovalentní vazba, iontové poloměry, mřížková energie, koordinační polyedry, základní strukturální typy, krystalová struktura a defekty. Nanočástice, povrchové a kvantové efekty. Inertní

elektronový pár. Násobné vazby mezi prvky hlavních skupin. Silikáty, alumosilikáty, zeolity, mesoporózní a vrstevnaté materiály. Sol-gelové a hydrotermální reakce. 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. Kyslík. Singletové a tripletové stavy molekuly kyslíku. Ozon. Oxidy, metody přípravy, struktura a chemické vlastnosti. Paulingova pravidla. Chemie oxokyselin a jejich solí. Peroxidy, superoxidy a ozonidy. Sulfidy, selenidy a teluridy. Chemie thiokyselin, jejich solí a dalších derivátů. Kationty a anionty chalkogenů. Halogeny, jejich oxidy a oxokyseliny. Halogenidy, příprava, struktura a chemické vlastnosti binárních a smíšených halogenidů. Interhalogenové sloučeniny. Vzácné plyny a jejich sloučeniny.

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, čtverná a vyšší násobné vazby mezi přechodnými kovy. 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.

Lanthanoidy, typické oxidační stavy, lanthanoidová kontrakce. Aktinoidy. Uran a jeho sloučeniny, příprava a použití. Nanostrukturní materiály, syntéza top-down a bottom-up.

3. Koordinační a organometalická chemie

Koordinační sloučeniny, koordinační částice, centrální atom, ligandy a jejich klasifikace, vlastnosti ligandů, koordinační číslo a koordinační polyedry, oktaedrické, tetraedrické, čtvercově planární a trigonálně bipyramidální komplexy, stereochemie a izomerie koordinačních sloučenin, stereochemicky nerigidní molekuly a ionty, stabilita komplexu. Vazba v koordinačních sloučeninách, teorie ligandového pole, štěpení degenerovaných energetických hladin, diagramy energetických hladin, Jahn-Tellerův efekt, spektrální a magnetické vlastnosti komplexů. Stabilizační energie ligandového pole. Vysokospinové a nízkospinové komplexy, spektrochemická řada. Kinetika a mechanismy tvorby komplexních 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. Metalloorganické sítě.

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. Metallocey. 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:

- Housecroft, C. E. *Anorganická chemie*. Vydavatelství VŠCHT Praha, 2014.
- 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.
- Schubert, U., Hüsing, N. *Synthesis of Inorganic Materials*. 3rd Ed. Wiley-VCH, Weinheim, 2012.
- 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.