

Okruhy ke státním závěrečným zkouškám v navazujících magisterských programech FCHT

Studijní program Chemie (N104)

Specializace Organická chemie (N104C)

4 povinné okruhy:

- Aplikovaná fyzikální chemie
- Metody určování struktury látek
- Organická syntéza
- Reaktivita organických sloučenin - katalýza

Podrobná specifikace okruhů

Aplikovaná fyzikální chemie

vychází z předmětů

Kinetika chemických a fotofyzikálních dějů (všechny specializace),

Fyzikální organická chemie (Organická chemie),

Kvantová chemie, Teoretické principy anorganické chemie (Anorganická chemie),

Výpočty a vizualizace molekul (Organická a Makromolekulární chemie),

Fyzikální chemie polymerů (Makromolekulární chemie)

Část společná:

1. Základní principy kvantové mechaniky – vlnová funkce, orbitaly, Schrödingerova rovnice, moment hybnosti, spin, elektronová hustota, operátory
2. Kvantově-mechanický popis molekul, báze AO, symetricky přizpůsobené orbitaly, MO-LCAO, metody výpočtu, hraniční orbitaly, celková energie
3. Základy chemické kinetiky, rychlostní rovnice, reakční intermediáty, tranzitní stav
4. Srážková teorie, energetická hyperplocha, katalýza homogenní a heterogenní
5. Termodynamický popis roztoků, směšovací veličiny, solvatace
6. Termodynamická rovnováha, termochemie
7. Interakce látek s elektromagnetickým zářením – excitované stavy, rotace, vibrace, elektronové excitace, fotochemie

Část organická chemie:

8. Vztahy mezi strukturou a reaktivitou, korelační rovnice, isotopové efekty
9. Kyseliny a báze, obecná a specifická katalýza, kyselost a bazicita v nevodných roztocích, basicita vs. nukleofilita
10. Substituční a eliminační reakce, kompetice, druhy S_N a E reakčních mechanismů, variace tranzitního stavu, účast sousedních skupin, stereochemie
11. Aromatická substituce elektrofilní a nukleofilní, substituční efekty, aktivující skupiny, efekt odstupující skupiny, regioselektivita
12. Adice nukleofilní a elektrofilní, meziprodukty, tranzitní stavy, katalýza
13. Molekulové přesmyky a pericyklické reakce, součinné vs. nesoučinné, termické vs. fotochemické reakce, klasické a neklasické karbokationty
14. Radikálové reakce, efekt rozpouštědla, metody studia mechanismů, kinetika
15. Hydrolýza esterů karboxylových kyselin, Ingoldova klasifikace

Část anorganická chemie:

8. Symetrie molekul, transformační matice, teorie grup, tabulky charakterů, rozklad na neredukovatelné reprezentace, aplikace na vibrační stavy molekul a molekulové orbitaly
9. Atomy a ionty v ligandovém poli – termy, spin-orbitální interakce, multiplety, multipólový rozvoj potenciálu, parametry ligandového pole, Tanabe-Suganovy diagramy
10. Homogenní rovnováha v plynech a kapalinách, bilanční matice, nezávislé reakce, rovnovážný rozsah reakce, podmínky rovnováhy
11. Vodné roztoky, acidobazické a redoxní rovnováhy, konstrukce Pourbaixových diagramů

12. Koordinační komplexy – vazba, termodynamické a kinetické aspekty reaktivity, optické a magnetické vlastnosti.
13. Fázová rovnováha, podmínky rovnováhy, T-x diagramy, ternární diagramy – izotermální řezy a projekce ploch likvidu, pole primární krystalizace
14. Heterogenní rovnováhy kondenzovaná fáze-plyn, částečně otevřené systémy, Ellinghamovy, Kellogovy diagramy, $\log(a)$ -T diagramy, izoaktivitní řezy

Část makromolekulární chemie

8. Molární hmotnost polymerů, její průměry a distribuce
9. Rozměrové charakteristiky polymerních molekul
10. Změny termodynamických veličin při vzniku roztoku polymeru
11. Koligativní vlastnosti roztoků polymerů
12. Rozptyl světla z roztoků polymerů, dynamický rozptyl světla
13. Viskozimetrie roztoků polymerů
14. Frakcionace polymerů, fázové diagramy, srážecí a rozpouštěcí frakcionace

Metody určování struktury látek

vychází z předmětu Metody určování struktury látek

Společné

1. Molekulová spektroskopie, principy absorpce a emise záření, měření UV spekter.
2. Kvantitativní analýza v molekulové spektroskopii, Lambertův-Beerův zákon.
3. Základní principy infračervené a Ramanovy spektroskopie.
4. Hmotnostní spektrometrie – fyzikálně-chemická podstata, metody ionizace, hmotnostní detektory.
5. NMR spektroskopie, princip metody, vznik a vývoj NMR signálu.
6. Strukturní krystalografie – princip metody a použití v určování struktury látek.
7. Elektronová spektroskopie pro chemickou analýzu (ESCA), princip metody a použití.

Organická chemie

8. Měření a interpretace jednodimenzionálních NMR spekter jader vodíku, uhlíku a fluoru.
9. Interpretace dvoudimenzionálních NMR spekter – homonukleární (COSY) a heteronukleární (HSQC a HMBC) techniky.
10. Nukleární Overhauserův efekt a jeho význam v NMR spektroskopii.
11. Využití hmotnostní spektrometrie ve strukturní analýze, molekulová hmotnost, přesná hmota a izotopová distribuce molekulového iontu.
12. Interpretace MS spekter, fragmentační mechanismy.
13. Využití IČ spekter ve strukturní analýze.
14. Chiroptické metody (ECD a VCD) a jejich využití ve strukturní analýze organických sloučenin.

Anorganická chemie

8. Elektronová mikroskopie a elektronová difrakce, principy instrumentace, využití
9. Rentgenová a neutronová difrakce a strukturní analýza – principy, instrumentace využití
10. Rietveldova metoda – strukturní parametry, kvantitativní analýza, určení velikosti částic.
11. Fotoelektronová spektroskopie a rentgenofluorescenční analýza

12. Magnetometrie – metody detekce magnetické odezvy, typy měření, vyhodnocení dat
13. Metody termické analýzy – DTA, DSC, TGA, vřazovací kalorimetrie, dilatometrie
14. Metody měření velikosti částic a měrného povrchu

Makromolekulární chemie (vychází také z předmětu Fyzikální chemie polymerů)

8. Metody stanovení molární hmotnosti (osmometrie, rozptyl el.mg. záření, SEC, princip univerzální kalibrace, Viskozimetrie, MALDI-TOF MS)
9. Metody stanovení rozměrů polymerních řetězců
10. TGA/DSC/DMA-principy, základní fázové přechody polymerů
11. Hodnocení vlastností polymerních tavenin
12. Hodnocení vulkanizačního procesu a polymerních sítí
13. Metody měření velikosti částic a měrného povrchu

Organická syntéza

vychází z předmětů Organická syntéza, Retrosyntéza a Stereoselektivní syntézy

1. Oxidace a redukce a jejich využití v organické syntéze.
2. Halogenace, aromatické nitrace, nitrosace, sulfonace a jejich využití v organické syntéze.
3. Využití reaktivních aromatických derivátů v syntéze. Reaktivita diazoniových solí, nukleofilní aromatické substituce.
4. Alkylace a acylace na heteroatomech a na uhlíkových atomech.
5. Organokovové sloučeniny (Li, Mg, Zn, Cu) a jejich využití v organické syntéze.
6. Reakce a funkční přeměny karbonylové a karboxylové funkce.
7. Využití základních chránících skupin v organické syntéze.
8. Retrosyntetická analýza – základní pojmy, přepólování.
9. Antiteze monofunkčních a difunkčních sloučenin.
10. Antiteze alkenů, alkynů a diaromatických sloučenin.
11. Antiteze karbocyklických a heterocyklických sloučenin, Baldwinova pravidla.
12. Stereoselektivní a stereospecifické reakce.
13. Kontrola relativní konfigurace u diastereoselektivních reakcí.
14. Chirální pomocné skupiny, chirální činidla a chirální katalyzátory jako nástroje enantioselektivní syntézy.

Reaktivita organických látek/Katalýza

vychází z předmětů Mechanismy organických reakcí a Přechodné kovy v organické syntéze

1. Elektrofilní a nukleofilní adiční reakce. Mechanismy adičních reakcí na násobné vazby C=C a C–heteroatom.
2. Nukleofilní a elektrofilní substituce na sp^2 a sp^3 hybridizovaných reakčních centrech.
3. Základní principy radikálových reakcí, perzistentní radikály, adice radikálů na násobné vazby, radikálové substituce. Příklady SET procesů.
4. Organokovové sloučeniny. Mechanismus tvorby Grignardových a organolithných činidel a příprava funkcionalizovaných organokovových sloučenin.
5. Základy multikomponentních reakcí, Biginelliho reakce, Ugiho reakce, Passeriniho reakce.
6. Přesmyky. Mechanismy nejvýznamnějších přesmyků.
7. Formální oxidační stav, 18-ti elektronové pravidlo, typy vazeb v organokovových sloučeninách, základní typy ligandů, reakce probíhající v koordinační sféře přechodných kovů.
8. Reakce koordinovaných alkenů a arenů s nukleofily.

9. Využití alkenů a alkynů v reakcích katalyzovaných přechodnými kovy, např. hydrogenace, hydrosilylace, hydroborace, hydrometalace, hydrokarbonylace, karbometalace.
10. Základní typy a principy cross-coupling reakcí.
11. Aktivace C–H a C–C vazeb, mechanismy C–H a C–C aktivací.
12. Přechodnými kovy katalyzovaná substituce allylových substrátů, asymetrická allylová substituce.
13. Fischerovy a Schrockovy karbenové komplexy – vlastnosti a využití v organické syntéze.
14. Multikomponentní reakce katalyzované přechodnými kovy.