**Okruhy ke SZZ pro navazující magisterský obor Organická chemie**

*Povinné předměty:*

OCH/SZZC1 – Laboratorní a průmyslová syntéza organických sloučenin

OCH/SZZC2 – Stereochemie a mechanismy organických reakcí

OCH/SZZC3 – Analýza organických sloučenin

OCH/OBHDP – Obhajoba diplomové práce

*Volba 1 předmětu z povinně volitelných:*

OCH/SZZC4 – Příprava a vlastnosti heterocyklických sloučenin

OCH/SZZC5 – Bioorganická chemie

OCH/SZZC6 – Aplikovaná analytická chemie

**OCH/SZZC1 – Laboratorní a průmyslová syntéza organických sloučenin**

*Garantem je prof. Ing. Pavel Hradil, CSc. Zkouška bude vyžadovat především znalosti získané v předmětu OCH/MOS1, OCH/POCH, OCH/STR a OCH/SAR. Jednotlivé okruhy pro tento předmět:*

1. Uhlovodíky – příprava, reaktivita. Průmyslové zdroje uhlovodíků a jejich základní zpracování.
2. Tvorba vazby uhlík-uhlík (reakce aldolizačního typu, couplingové reakce, další možnosti jak vytvořit vazbu uhlík uhlík. Sekundární zpracování ropných produktů (krakování, pyrolýza a reformování benzínů.
3. Tvroba halogenderivátů - F, Cl, Br, I (alifatické halogenderiváty trifuoroderiváty a jejich příprava, příprava vinylderivátů, aromatické halogenderiváty), vlastnosti a reakce. Výroba CCl4 – tetra-per postup, výroba vinylchloridu (stará i nová), průmyslová výroba alifatických fluoroderivátů a fuoroaromátů.
4. Organokovové sloučeniny nepřechodných kovů Mg, Na, Li – přípravy, reakce a jejich využití v organické syntéze. Průmyslová příprava organohořečnatých sloučenin – rozpouštědla, podmínky, příklady použití.
5. Dusíkaté sloučeniny příprava a reakce alifatických a aromatický amino derivátů, nitro látek, nitroso látek, hydroxylaminů, derivátů hydrazinu, diazosloučeniny, azosloučeniny, diazoniové soli, azidy. Výroba nitrobenzenu, TNT. Výroba 1 a 2- aminonaftolu, výroba benzidinu. Biologické vlastnosti.
6. Příprava a reakce alkoholů, etherů, epoxidů. Průmyslová výroba diethyletheru, oxiranu a epichlorhydrinu.
7. Příprava a reakce karbonylových sloučenin – aldehydů a ketonů (oximy, hydrazony, acetaly, thioacetaly, ozonidy. Výroby acetonu – základní postupy a reakční podmínky. Průmyslové výroby cyclohexanonu a kaprolaktamu.
8. Karboxylové kyseliny a jejich deriváty funkční i substituční – příprava, reakce. Výroby kyseliny octové, acetanhydridu, ketenu.
9. Deriváty kyseliny uhličité – přípravy a reakce – karbamáty, močoviny, karbamoylchloridy, izokyanáty, isothiokyanáty, isokyanidy, karbodiimidy a další. Výroba isokyanátů a jejich použití pro výrobu polymerů.
10. Organoborité sloučeniny – příprava, vlastnosti a využití v organické syntéze. Povrchově aktivní látky, rozdělení a způsoby výroby.
11. Organokovové sloučeniny Zn, Zr, Ti, Cu, a Sn – přípravy, reakce a jejich využití v organické syntéze. Akryláty, jejich výroba a použití.
12. Organofosforečné sloučeniny a reagenty obsahující atom fosforu – příprava, vlastnosti a využití v organické syntéze. Aminoplasty – základní typy látek, výroba, použití.
13. Základní typy vazeb v organické chemii, jejich síla a reaktivita z pohledu teorie hraničních orbitalů, hyperkonjugace, pKa organických látek, vliv substituce na HOMO/LUMO a na reaktivitu nuklefilů/elektrofilů. Výroby fenolu,  a  naftolu.
14. Základní principy a faktory ovlivňující design syntézy. Rozdělení výbušin, základní představitelé a způsob jejich výroby.
15. Retrosyntetická analýza. Zpracování dehtu – hlavní produkty.
16. Zdroje a metody přípravy enantiomerně čistých sloučenin. Průmyslová výroba sacharózy.
17. Protektivní a deprotektivní operace v organické syntéze. Průmyslově využívané redukční metody - příklady.
18. Rozdělení syntéz dle účelu a jejich příklady (kombinatoriální, target-oriented, diversity-oriented). Základní barviva, příklady a výroba, indigo a jeho průmyslová výroba

**OCH/SZZC2 – Stereochemie a mechanismy organických reakcí**

*Garantem je prof. RNDr. Jan Hlaváč, Ph.D. Zkouška bude vyžadovat především znalosti získané v předmětu OCH/SCH a OCH/MOR. Jednotlivé okruhy pro tento předmět:*

1. Substituce nukleofilní v alifatické řadě
2. Substituce nukleofilní v aromatické řadě
3. Substituce elektrofilní
4. Adice elektrofilní
5. Adice nukleofilní
6. β-eliminace
7. α-eliminace
8. Přesmyky nukleofilní
9. Přesmyky elektrofilní
10. Radikálové reakce
11. Prvky symetrie, chiralita, optická aktivita, isomerie
12. Centrální, axiální a planární chiralita
13. Metody pro dělení optických isomerů, optická čistota
14. Metody pro určování konfigurace
15. Konformace a konformační analýza

**OCH/SZZC3 – Analýza organických sloučenin**

*Garantem je prof. RNDr. Jan Hlaváč, Ph.D. Zkouška bude vyžadovat především znalosti získané v předmětu OCH/OPM, OCH/NMR a OCH/SMOC. Jednotlivé okruhy pro tento předmět:*

1. Princip NMR spektroskopie a její význam ve strukturní analýze.
2. Chemický posun v 1H a 13C NMR spektroskopii.
3. Spin-spinová interakce a její význam ve strukturní analýze. Interakční konstanta.
4. Intenzita NMR linií v 1H a 13C NMR a její význam ve strukturní a kvantitativní analýze.
5. 2D NMR spektroskopie a její použití pro strukturní analýzu.
6. Princip UV-VIS spektrofotometrie a její využití ke kvalitativní a kvantitativní analýze.
7. Infračervená spektrometrie. Princip metody a techniky přípravy vzorků a měření.
8. Interpretace IČ spekter.
9. Princip Ramanovy spektrometrie a její využití ve strukturní analýze.
10. Princip extrakce. Popis jednotlivých provedení extrakce – LLE, headspace, SPE a SFE.
11. Princip kapalinové chromatografie. Kvalitativní a kvantitativní vyhodnocení chromatogramu.
12. Instrumentace kapalinové chromatografie. Složení stacionární a mobilní fáze.
13. Vliv stacionární fáze, mobilní fáze a pH na chromatografickou separaci.
14. Princip a instrumentace plynové chromatografie. Spojení s hmotnostní spektrometrií.
15. Princip hmotnostní spektrometrie. Popis instrumentace používané ve spojení s kapalinovou chromatografií.
16. Základní interpretace hmotnostních spekter.

**OCH/SZZC4 – Příprava a vlastnosti heterocyklických sloučenin**

*Garantem je prof. Ing. Pavel Hradil, Ph.D. Zkouška bude vyžadovat především znalosti získané v předmětu OCH/CHHS, OCH/CBL1, OCH/CBL2 a OCH/COS. Jednotlivé okruhy pro tento předmět:*

1. Příprava a vlastnosti pětičlenných dusíkatých heterocyklů: pyrrol, pyrazol, imidazol, triazol, tetrazol a jejich deriváty. Přírodní látky a syntetické, biologicky aktivní sloučeniny obsahující daný heterocyklický motiv. Využití organometalických reagentů a tranzitními kovy katalyzovaných reakcí při přípravě těchto látek.
2. Příprava a vlastnosti pětičlenných heterocyklů obsahující ve své struktuře i jiný atom než dusík: furan, thiofen, thiazol, isothiazol, oxazol, isoxazol a jejich deriváty. Přírodní látky a syntetické, biologicky aktivní sloučeniny obsahující daný heterocyklický motiv. Využití organometalických reagentů a tranzitními kovy katalyzovaných reakcí při přípravě těchto látek.
3. Příprava a vlastnosti kondenzovaných pětičlenných heterocyklů: indol, indazol, benzimidazol, benztriazol, benzoxazol, benzthiazol, benzo[b]furan a jejich deriváty. Přírodní látky a syntetické, biologicky aktivní sloučeniny obsahující daný heterocyklický motiv. Využití organometalických reagentů a tranzitními kovy katalyzovaných reakcí při přípravě těchto látek.
4. Příprava a vlastnosti šestičlenných heterocyklů: pyridin, pyrimidin, pyrazin, triaziny, pyran, thiopyran a jejich deriváty. Přírodní látky a syntetické, biologicky aktivní sloučeniny obsahující daný heterocyklický motiv. Využití organometalických reagentů a tranzitními kovy katalyzovaných reakcí při přípravě těchto látek.
5. Příprava a vlastnosti kondenzovaných šestičlenných heterocyklů: chinolin, isochinolin, chinazolin, chinoxalin, ftalazin, fenothiazin a jejich deriváty. Přírodní látky a syntetické, biologicky aktivní sloučeniny obsahující daný heterocyklický motiv. Využití organometalických reagentů a tranzitními kovy katalyzovaných reakcí při přípravě těchto látek.
6. Příprava a vlastnosti vybraných sedmičlenných heterocyklů: diazepiny, oxazepiny, benzodiazepiny a jejich deriváty. Přírodní látky a syntetické, biologicky aktivní sloučeniny obsahující daný heterocyklický motiv. Využití organometalických reagentů a tranzitními kovy katalyzovaných reakcí při přípravě těchto látek.
7. Příprava a vlastnosti vybraných kombinovaných heterocyklů: purin, pteridin, imidazopyridiny a jejich deriváty. Přírodní látky a syntetické, biologicky aktivní sloučeniny obsahující daný heterocyklický motiv. Využití organometalických reagentů a tranzitními kovy katalyzovaných reakcí při přípravě těchto látek.
8. Příprava a vlastnosti šestičlenných nasycených heterocyklů (piperidin, piperazin, morfolin) a jejich výskyt v biologicky aktivních a přírodních látkách. Využití organometalických reagentů a tranzitními kovy katalyzovaných reakcí při přípravě těchto látek.

**OCH/SZZC5 –** **Bioorganická chemie**

*Garantem je doc. RNDr. Milan Urban, Ph.D. Zkouška bude vyžadovat především znalosti získané v předmětu OCH/ZPBC a OCH/KBCH. Jednotlivé okruhy pro tento předmět:*

1. Aminokyseliny. Přehled, vlastnosti, příprava - asymetrická syntéza -aminokyselin, asymetrická syntéza s chirálním organometalickým katalyzátorem, syntéza oligopeptidů a jejich význam v medicíně. Biosyntéza aminokyselin.
2. Peptidy polypeptidy a proteiny. Historie studia peptidů. Struktura a fyzikální vlastnosti peptidů. Klasifikace peptidů. Chemická syntéza peptidů. Chránění aminoskupiny a karboxylové skupiny. Biosyntéza proteinů.
3. Enzymy. Mechanizmy enzymatických reakcí, kofaktory a regulace enzymatických reakcí, termodynamika a kinetika enzymatických reakcí, inhibice. Vliv různých faktorů na enzymatické reakce.
4. Sacharidy. Struktura a funkce sacharidů a polysacharidů. Metabolizmus. Reakce sacharidů - reakce karbonylové skupiny, reakce anomerní hydroxylové skupiny, reakce hydroxylových skupin. Syntéza glykosidů a oligosacharidů.
5. Lipidy. Přehled lipidů. Mastné kyseliny. Složené lipidy. Biomembrány. Regulační procesy na membránách. Biosyntéza a metabolizmus lipidů. Mitochondrie.
6. Nukleové kyseliny. Chemie nukleosidů, nukleotidů a oligonukleotidů: chemické syntézy nukleosidů, modifikace nukleobází, cukerné složky, syntéza nukleotidů, oligonukleotidů, katabolismus nukleotidů. Terapeutické aplikace nukleosidových analog. Struktura a funkce nukleových kyselin: struktura DNA a RNA, párování nukleobází, interakce malých molekul - reakce s nukleofily, elektrofily, anti-cancer drugs, DNA repair, interkalace.
7. Biosyntéza a metabolismus nukleových kyselin a jejich složek: replikace, transkripce, enzymy biosyntézy složek nukleových kyselin, inhibitory biosyntézy prekurzorů bází a anabolismu nukleosidů, enzymy katabolismu nukleových kyselin.
8. Bioorganická chemie ostatních tříd přírodních látek. Eikosanoidy – prostaglandiny, thromboxany, leukotrieny. Terpeny a steroidy. Steroidy jako signální molekuly.
9. Principy stavby virů, jejich taxonomie, klasifikace virů. Životní cyklus virů, rozmnožování jednotlivých typů virů, jednotlivé fáze životního cyklu virů, cesty infekce organizmu viry, některé pojmy související s viry. Viry a nádorová onemocnění. Vakcíny, typy vakcín. Viry způsobující závažná onemocnění a epidemie u lidí.
10. Inhibitory jednotlivých stupňů rozmnožování virů. Látky ovlivňující adsorpci virionu na buněčnou membránu. Látky interagující s povrchovou strukturou virionu. Inhibitory syntézy virových nukleových kyselin (analoga substrátu, analoga produktu, inhibitory herpesvirové helikázy-primázy, inhibitory RNA-dependentní-RNA polymerázy, inhibitory DNA-dependentní RNA-polymerázy). Inhibitory HBV. Inhibitory HCV. Inhibitory serinové HCMV proteázy. Inhibitory cysteinové rhinovirové proteázy.
11. Inhibitory viru HIV (inhibitory průniku do buňky, nukleosidové inhibitory reverzní transkriptázy (NRTIs), nukleotidové inhibitory reverzní transkriptázy (NtRTIs), nenukleosidové inhibitory reverzní transkriptázy (NNRTIs), inhibitory HIV integrázy a transkripce virové RNA, inhibitory HIV proteázy. Současná antiretrovirová terapie pacientů s HIV infekcí.
12. Acyklické nukleosidy a nukleotidy acyklické nukleosidy, acyklické nukleosidfosfonáty, nové cyklické fosfonáty.
13. Protinádorová a antileukemická chemoterapie Alkylační léčiva. Mechanizmus účinku DNA alkylačních cytostatik. Skupiny alkylačních léčiv. Pt-komplexy. Cytostatika založená na selektivním účinku v hypoxických buňkách.
14. Inhibitory topoisomeras, specifické inhibitory topoizomerázy I, inhibitory topoisomerasy II. Inhibitory angiogeneze. Inhibitory thymidin fosforylázy. Látky s radiomimetickým účinkem. Telomeráza a její inhibitory.
15. Antimitotické látky interagující s tubulinem. Inhibitory proteinkináz. Inhibitory prenylace proteinů. Inhibice nežádoucích účinků androgenů a estrogenů.

**OCH/SZZC6 –** **Aplikovaná analytická chemie**

*Garantem je prof. RNDr. Karel Lemr, Ph.D. Zkouška bude vyžadovat především znalosti získané v předmětu ACH/APHS a ACH/APLC. Jednotlivé okruhy pro tento předmět:*

1. Instrumentace v kapalinové chromatografii, chromatografické módy.
2. Řešení problémů v kapalinové chromatografii („troubleshooting“, optimalizace separace).
3. Moderní detekce v kapalinové chromatografii, typy používaných detektorů.
4. Příprava vzorku pro analýzu kapalinovou chromatografií.
5. Kapilární elektroforéza a elektrochromatografie, porovnání s kapalinovou chromatografií.
6. Kapalinová chromatografie ve farmaceutické a klinické praxi.
7. Kapalinová chromatografie v kontrole potravin a životního prostředí.
8. Chromatografická analýza (bio)polymerů.
9. Chromatografická separace izomerů a enantiomerů.
10. Měření a zpracování chromatografických dat.
11. Miniaturizace v kapalinové chromatografii, využití kapilárních technik.
12. Preparativní kapalinová chromatografie.
13. Princip ionizačních technik využívaných pro ionizaci organických sloučenin.
14. Spojení plynové a kapalinové chromatografie s hmotnostní spektrometrií.
15. Matriční efekty ovlivňující ionizaci látek.
16. Principy hmotnostních analyzátorů.
17. Interpretace hmotnostních spekter organických sloučenin (určení sumárního vzorce, strukturní analýza).
18. Ambientní ionizační techniky a analýza povrchů.
19. Hmotnostně spektrometrické zobrazování.
20. Spojení iontové mobility s hmotnostní spektrometrií.
21. Aplikace hmotnostní spektrometrie při identifikaci metabolitů, ve farmaceutické a toxikologické analýze.
22. Analýza biomakromolekul.
23. Hmotnostní spektrometrie v prvkové analýze.