



Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 16 (2017/2018)

Řešení série 4

Anketa

Nejprve bychom vám všem chtěli poděkovat za vyplnění ankety. Sešlo se nám jich 36. Na základě vašeho hlasování byl na příští ročník vybrán seriál s názvem *Určování struktury molekul pomocí NMR*, který pro vás bude psát Pavel Řezanka. V letošním ročníku vás nejvíce zaujala úloha *Znamení chemikruhu* s 20 hlasy, na druhém místě skončila úloha *Ropovod Družba* s deseti hlasy těsně následovaná úlohou *Strukturní bludiště* s devíti hlasy. Čtvrtá příčka pak patří úloze *Hexagonální* s osmi hlasy. Z loňských úloh vám v paměti nejvíce zůstala úloha *Orbitalová*, která od vás získala šest hlasů, a úlohy *Bez nápadu* a *Malované křížovky* shodně s pěti hlasy. Nejvíce byste chtěli úlohy, které souvisí s každodenním životem (29 hlasů) a s novinkami ve výzkumu a v laboratoři (22 hlasů). Budeme to mít při tvorbě úloh v příštím ročníku na zřeteli. Přibližně třetina (13) z vás řešila KSICHT již loni a většina z vás (32) se účastní Chemické olympiády. Na výletech preferujete (33 hlasů) odbornou exkurzi v chemickém průmyslu.

Závěrem mnohokrát děkujeme za vaše názory, připomínky i děkovné dopisy. Budeme se i nadále snažit vést KSICHT k vaší spokojenosti.

Přihláška do sedmnáctého ročníku KSICHTu

Do dalšího ročníku KSICHTu se můžete přihlásit registrací¹ na našich webových stránkách. První sérii 17. ročníku očekávejte ve svých schránkách začátkem října.

Staňte se KSICHTím organizátorem

Pro ty z vás, kteří již teď litují, že se s KSICHTem již víckrát nesetkají, neboť již opouštějí řady středoškoláků, máme dobrou zprávu. Stačí se stát KSICHTím organizátorem a KSICHT z vašeho života nezmizí. Co pro to stačí udělat? Kontaktujte nás², a nebo ještě lépe: zkuste rozpracovat krátkou úlohu o něčem, co vás poslední dobou zaujalo, a pošlete nám ji. Nebojte se, pomůžeme vám s ní, a ještě se přitom naučíte, jak funguje vědecké recenzní řízení (peer-review), což se vám do života bude hodit. Už teď se na vaše úlohy těšíme.

Přejeme vám příjemné prožití letních prázdnin a s mladšími řešiteli se těšíme na shledanou v příštích ročnících KSICHTu. Vám, odrostlejšími řešiteli, pak přejeme hodně úspěchů a doufáme, že zkušenosti nasbírané při řešení našeho semináře vám budou užitečné v dalším studiu a práci.

Vaši KSICHTí organizátoři

¹ <http://ksicht.natur.cuni.cz/prihlaska>

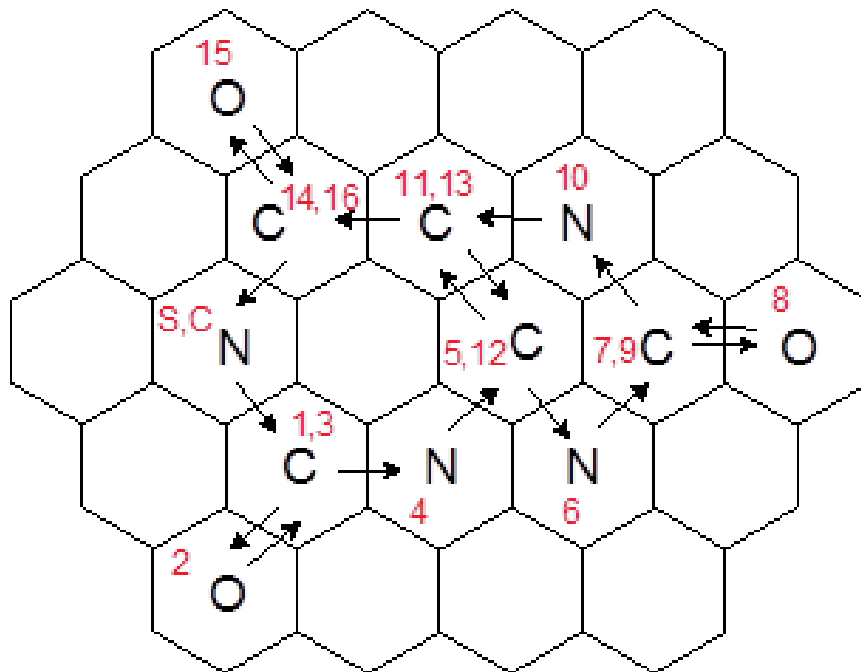
² ksicht@natur.cuni.cz

Řešení úloh 4. série 16. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Strukturální bludiště

(7 bodů)

Autor: Jakub Režňák



1. Kyselina močová.
2. Ano, je konečným produktem odbourávání purinů, které organismus mj. přijímá v potravě.
3. Je jedním z antioxidantů, zároveň je vylučována jako odpadní produkt, její nadbytek se označuje jako hyperurikémie (projevuje se např. jako dna).
4. Celý seznam
 - sorbitol – (2*S*,3*R*,4*R*,5*R*)-hexan-1,2,3,4,5,6-hexol
 - styren – ethenylbenzen
 - thiokresol – methylbenzenthiool (lokanty 2- 3- 4-)
 - vinylchlorid – chlorethen
 - acetaldehyd – ethanal
 - dithian – dithiacyklohexan (lokanty 1,2- 1,3- 1,4-)
 - pyrokatechol – benzen-1,2-diol
 - formaldehyd – methanal
 - pyrogallol – benzen-1,2,3-triol
 - acetylen – ethyn

Otázka 1 – 4 body, 2 – 0,5 bodu, 3 – 0,5 bodu a 4 – 2 body. Celkem 7 bodů.

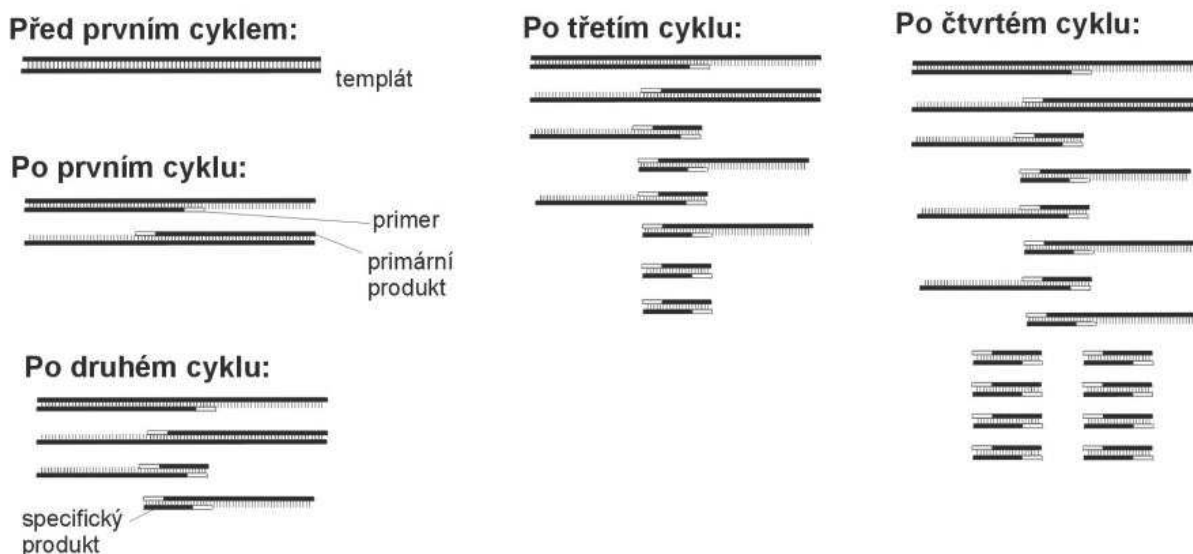
Úloha č. 2: DNA snadno a rychle

(7 bodů)

Autorka: Lenka Šimonová

1. Termostabilní enzymy obsahují větší množství vodíkových vazeb, solných můstků, disulfidových můstků mezi cysteiny, jejich podjednotky jsou pevněji vázané a také jsou celé kompaktnější. Termostabilitě může napomoci také oligomerizace. Termostabilní enzymy nalézáme u tzv. extremofilů, nejčastěji u extremofilních archeí, jako jsou například termofilní či halofilní archea.
2. Pokud bychom pro PCR nepoužili termostabilní DNA polymerasu, hned v prvním denaturačním kroku by byla DNA polymerasa denaturována (jedná se o klasickou bílkovinu), tedy v kroku III by se nesynthetisovalo nové vlákno DNA. Nevznikla by žádná nová DNA.
3. DNA dependentní DNA polymerasa má v mezinárodním E.C. značení toto označení – EC 2.7.7.7. Patří tedy do třídy transferas, konkrétně fosfotransferas, nejpřesněji nukleotidyltransferas.

Během PCR nám postupně vznikají různé produkty:



Obr. 2: Vývoj reakční směsi během prvních čtyř cyklů PCR

4. Primární produkt může vzniknout jen z templátové DNA, v každém cyklu tedy vzniknou dvě nová vlákna ssP, po n cyklech tedy bude $ssP = 2n$ (pro $n = 35$ $ssP = 2 \times 35 = 70$). Specifický produkt vzniká podle primárního produktu a nebo specifického produktu. V otázce jsem se nevyjádřila přesně, uznávala jsem tedy dva různé výrazy pro dsS. V prvním případě předpokládáme, že dsS vzniká jen dosyntetizováním vlákna k jednomu vláknu ssS, tedy $dsS(n) = ssS(n - 1) = 2^n - 2n$. Nebo předpokládáme, že všechna jednovláknová ssS se spárují do dsS. Počet ssS můžeme vyjádřit jako počet všech

vláken (2^{n+1}) bez vláken primárního produktu ($2n$) a bez templátu (2). Tedy $dsS = (2^{n+1} - 2n - 2)/2 = 2^n - n - 1$. Výsledek pro $n = 35$ se příliš neliší: $dsS = 3,44 \cdot 10^{10}$. Během PCR v reakční směsi nevznikají žádné molekuly templátu, $dsT = 0$. ($ssT =$ jednovláknový (single strand) templát, $dsT =$ dvouvláknový (double strand) templát, $ssP =$ jednovláknový primární produkt, $ssS =$ jednovláknový specifický produkt, $dsS =$ dvouvláknový specifický produkt).

5. Ve všech výpočtech si vystačíme s trojčlenkou, případně použijeme vzorec pro výpočet koncentrace $c = \frac{n}{V}$ a jeho obměny.

Tabulka 1: Rozpis reakce

	$V / \mu\text{l}$	C_{final}
5x Phusion HF Buffer ³	6	1×
10 mM dNTPs	1,5	0,5 mM
10 μM kódující primer	1,5	500 nM
10 μM reversní primer	1,5	500 nM
DNA, 1 mg/l	5	0,167 mg/l
Phusion DNA polymerasa, 2000 U/ml	0,3	20 U/ml
H ₂ O	14,2	
celkem	30	

6. Takzvané “dNTPs” (čti *dí-en-tý-pís*) jsou deoxyribonukleosid trifosfáty, tedy směs dATP (deoxyadenosintrifosfát), dGTP (deoxyguanosintrifosfát), dTTP (deoxythymidintrifosfát) a dCTP (deoxycytidintrifosfát). Jedná se o „stavební kameny“ nově vznikající DNA, které jsou připojovány pomocí DNA polymerasy ve směru $5' \rightarrow 3'$. Pozor, není možné říci, že se DNA skládá z dNTPs, neboť pyrofosfátová skupina je během reakce odštěpena!
7. Termostabilních polymeras dnes existuje celá řada, použít můžeme například: Taq (z *Thermus aquaticus*), Pfu (z *Pyrococcus furiosus*), Pwo (z *Pyrococcus woesei*), ...
8. Jelikož navrhujeme DNA primery (zůstávají součástí nově vzniklého vlákna), budou přímo komplementární k podtržené sekvenci (v případě reversního primeru), respektive budou součástí podtržené sekvence (kódující primer). Délka primeru by měla být přibližně 20 bází. Pro návrh primerů existuje mnoho omezení a doporučení, avšak tato jsem nebrala v potaz.

³ Jedná se “biochemické” značení, používané často u pufrů. Tento zápis znamená, že pufr je třeba 5x naředit, aby byla výsledná koncentrace správně. Výsledná koncentrace tedy bude 1x Phusion HF Buffer. Výrobce například nechce prozradit složení svého pufru, proto jen napíše, kolikrát je třeba ho naředit.

5'-

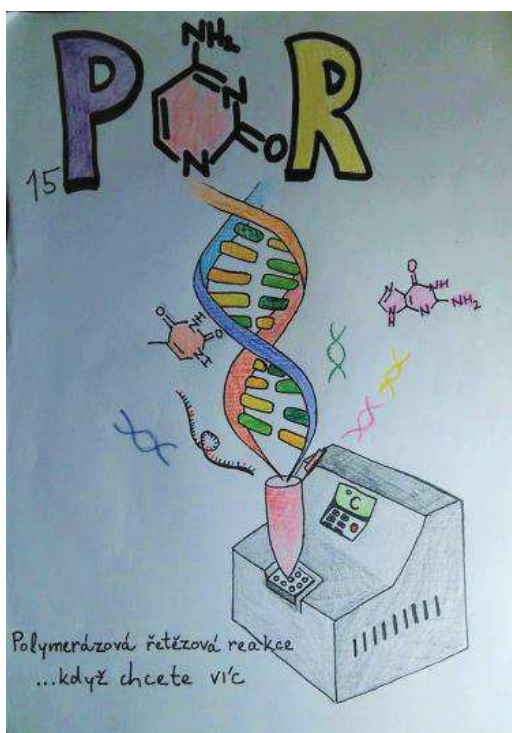
AGAGGTGCTACGCTACAGCTAAATCGTAAACTTACTTGTA
AAATCTGGAATAGAGCCAAGACATCAGAATCAGATCAAAACGTAGCTCGATCGTAT
CGATCTGGCTAATCGTCGACTACTAAGCTTCGATTGACTGTTCTATTG
CAGCTCCATTGATCGATCGATTTTGCTTAGCGTCATGCTAATCGATTGC
ACACAGCTCGCATTGTCATCGTTGAACATCGTCAGAACTTAATCTCAT
GATCCCATATGCATGTGACTCGTCAATCGACATTGCCGATTGCTACAT
CGTCATCGACATTGCATCGTCATCGAGTTTCATTAAGCTCACATCGTCA
GACACAGATTTGCTAGTGGATAGGGCTACATATCGACTAAAGACGAG
ATCGTATAGAGATCTA-3'

kódující primer: 5' - AATCGTAAACTTACTTGTA - 3'

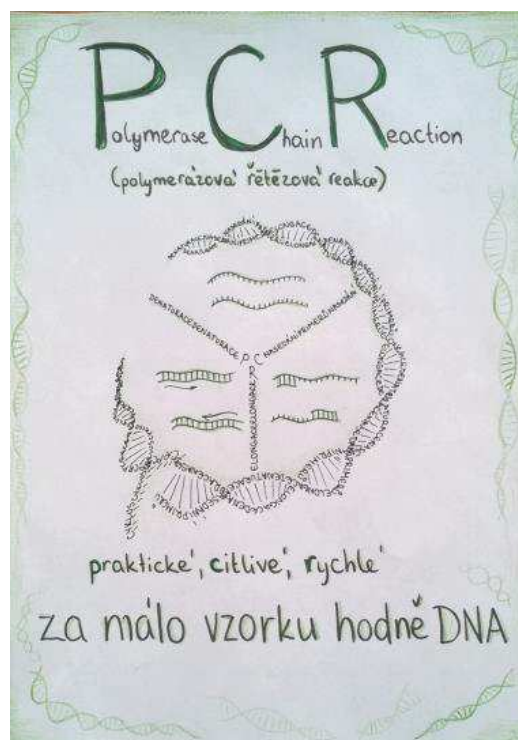
reversní primer: 5' - AGTCGATATGTAGCCCTATC - 3'

9. Důvodů, proč nevznikne nová DNA, může být opravdu mnoho. Třeba zapomeneme přidat nějaký reaktant, špatně zvolíme teplotu nasedání primerů (primery mají různou teplotu nasedání) nebo mohou být primery špatně navržené. Třeba jsou příliš krátké a nasedají nespecificky jinam, než bychom si přáli, a tedy získáme sice DNA, ale úplně jinou, než jsme chtěli. Nebo jak poznamenala Iva Švecová – spikly se proti nám nebeské mocnosti.

10. Ze zaslaných letáček jsem měla ohromnou radost, plánuji si s nimi vyzdobit laborku :-). Zde pár vybraných:



Marie Grunová



Iva Švecová



Michaela Kramářová



Miroslava Novoveská

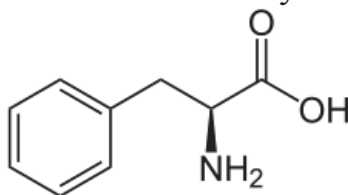
Otázka 1 – 0,6 bodů, 2 – 0,2 bodů, 3 – 0,4 bodů, 4 – 1,2 bodů, 5 – 0,6 bodů, 6 – 0,3 bodů, 7 – 0,6 bodů, 8 – 1,6 bodů, 9 – 0,5 bodů, 10 – 1 bod. Celkem 7 bodů.

Úloha č. 3: Novorozenecká

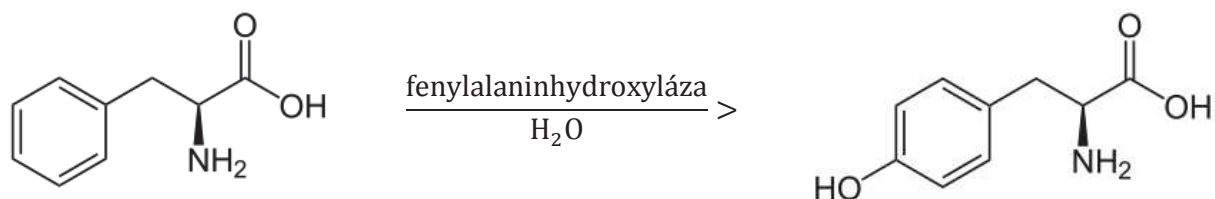
(8 bodů)

Autorka: Pavlína Muchová

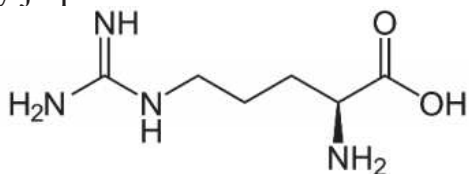
1. Fenyketonurie se týká metabolismu aminokyseliny fenylalaninu.



2. Je porušen gen pro enzym fenylalaninhydroxylázu, která katalyzuje hydroxylaci fenylalaninu na tyrosin.

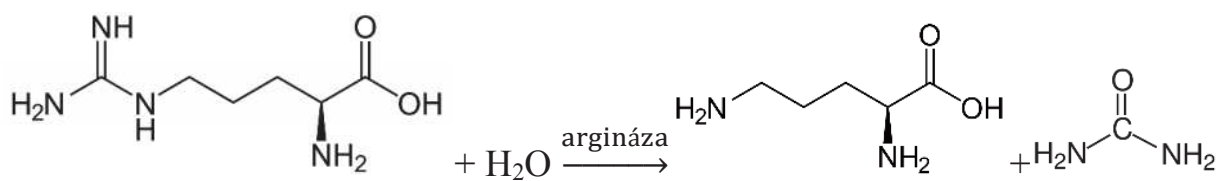


3. Argininemie je nemoc, kdy je porušen metabolismus aminokyseliny argininu.



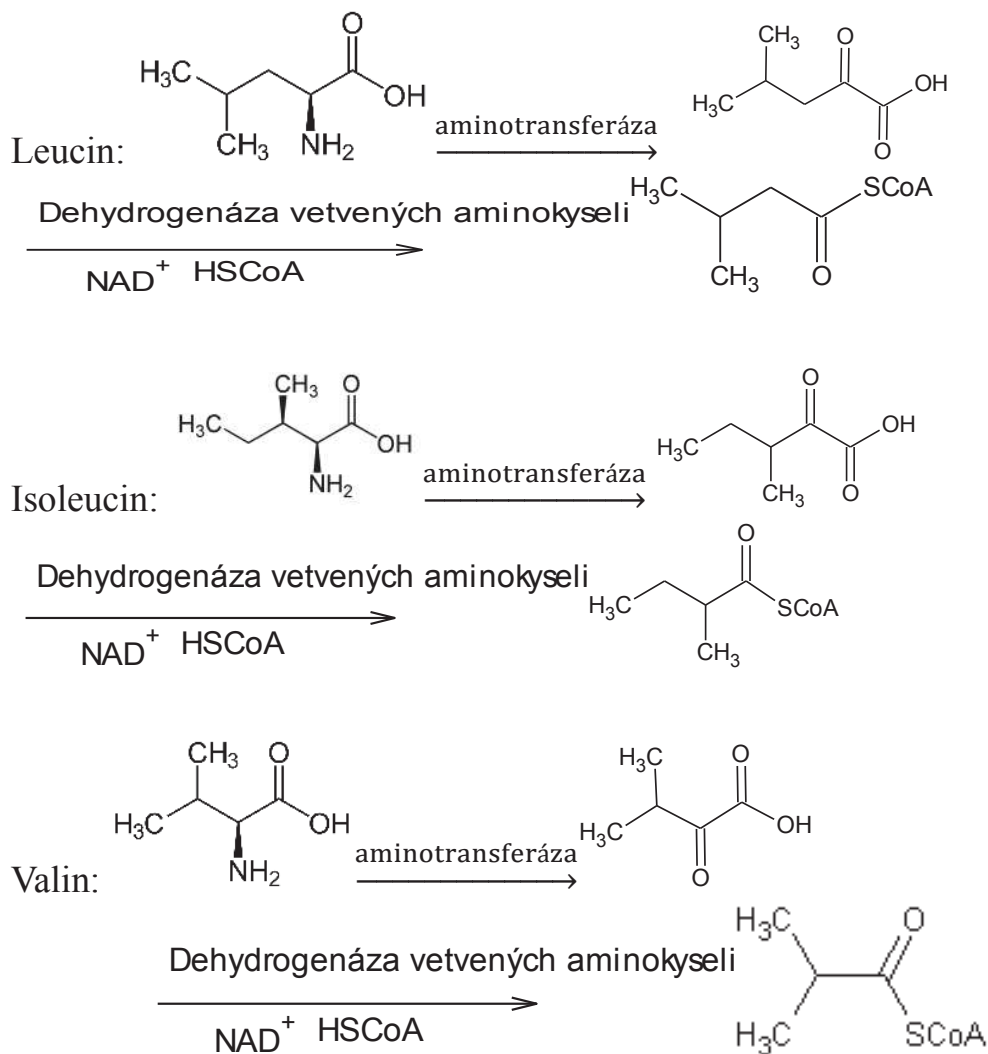
4. Arginin je aminokyselina, která je nezbytnou součástí ornitinového/močovinového cyklu.

5. Při argininemii je nefunkční enzym argináza/arginin amididáza/kanavanáza katalyzující přeměnu argininu na ornitin:



6. Leucinóza je choroba, při které není správně metabolizována skupina takzvaných rozvětvených aminokyselin (BCAA) – leucin, izoleucin a valin.

7. Postižen je enzym dehydrogenáza větvených aminokyselin, respektive ketokyselin, která degraduje právě tyto aminokyseliny. Nekatalyzuje však hned první degradační reakci, ale až druhou v pořadí po aminotransferáze.



Leucin → α -ketoisokaproová kyselina → isovaleryl-CoA

Isoleucin → α -keto- β -methylvalerová kyselina → α -methylbutyryl-CoA

Valin → α -ketoisovalerová kyselina → isobutyryl-CoA

8. Pro nemoc je typická nasládlá vůně moči i jiných tělesných sekretů připomínající karamel či právě javorový sirup.
9. Arginin, fenylalanin, leucin, isoleucin i valin jsou esenciální aminokyseliny, lidské tělo si je tedy nedokáže syntetizovat samo. Proto se dá jejich přívod v rámci specifických diet regulovat, což zajišťuje eliminaci nežádoucích důsledků těchto chorob.
10. Vzorek krve je třeba odebrat až v momentě, kdy dítě plnohodnotně přijímá potravu a samo ji zpracovává – pouze tehdy můžeme identifikovat, zda je některá metabolická dráha defektní. Ke vzniku neobvyklých produktů přeměny aminokyselin dochází až při vysoké koncentraci nemetabolizovaných aminokyselin v těle. Čekáme na projevy případné nepřítomnosti inkriminovaných enzymů, projevených buď zvýšenou koncentrací

aminokyselin nebo právě patologickými produkty. Také se čeká na nejvýhodnější koncentrace u všech onemocnění. Některé markery totiž s časem po narození klesají a některé stoupají, přičemž třetí den byl vyhodnocen jako den s nejmenším počtem falešně negativních výsledků.

11. Hodnoty ve spektrech byla převzata z NIST WebBook⁴, jedná se o píky samotných ionizovaných aminokyselin, nikoliv o produkty vznikající rozbitím proteinů.

Aminokyselina	m/z
Fenylalanin	74
Valin	72
Leucin	86
Isoleucin	86
Arginin	69

Otázka 1 – 0,5 bodu, 2 – 1 bod, 3 – 0,5 bodu, 4 – 0,5 bodu, 5 – 1 bod, 6 – 0,5 bodu, 7 – 1 bod, 8 – 0,5 bodu, 9 – 0,5 bodu, 10 – 1 bod a 11 – 1 bod. Celkem 8 bodů.

⁴ <http://webbook.nist.gov/>

Úloha č. 4: Trable pana Šmudly**(14 bodů)**

Autor: Vojtěch Hamala

1. Při nákupu větších množství se ukazují obvyklé zdroje (např. Sigma-Aldrich®) jako nevhodné (malá množství, vysoká cena). Rychlým průzkumem internetu však najedeme zdroje i jiné, které nabízejí větší kvantitu. Například:

Výrobce	Cena
Beijing Starget Chemicals Co., Ltd.	1-5 USD / kilogram
Anhui Sincerely Titanium Industry Co., Ltd.	1 000-1 100 USD / tuna
Shandong Allplace Environmental Protection Technology Co., Ltd.	500-1 100 USD / tuna

Uznává se jakýkoli legitimní zdroj.

2. Hnací plyn do sprejů (nejvíce), palivo, nízkovroucí rozpouštědlo a extrakční činidlo, výroba dimethyl sulfátu, chladicí médium v ledničkách, lékařství („vypalování“ bradavic) atd.
3. Rovnice:

$$2 \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow (\text{CH}_3)_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$$

Výpočet:

$$m_{\text{methanol}} = \frac{2 \cdot M_{\text{methanol}} \cdot m_{\text{ether}}}{M_{\text{ether}}} = \frac{2 \cdot 32,04 \cdot 1\text{t}}{46,07} = 1,391 \text{ tun}$$

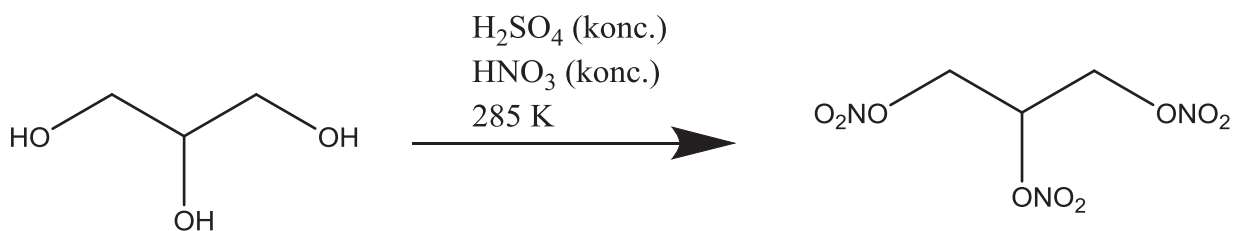
4. Ne. Reakce je rovnovážná, nikdy neproběhne ze 100 %.
5. Pro řešení je možné použít některou z online kalkulaček či využít tabulkový editor (např. MS Excel). Možné je řešení i simplexovou metodou na papíře.

Optimální řešení vypadá takto:

	DC 1	DC 2	DC 3	DC 4
Závod A	800 t	200 t	0 t	0 t
Závod B	0 t	0 t	100 t	1900 t
Závod C	0 t	1000 t	1500 t	0 t

Celkové náklady budou: **294 600 EUR.**

6.



7. Nitroglycerin se v lékařství používá pro léčbu onemocnění srdce nebo vysokého krevního tlaku.
8. Anglický pojem pro peněžní tok je **Cash Flow**. Na rozdíl od výsledku hospodaření počítá s reálnými výdaji a ne účetními náklady.

Příklad: Pan Šmudla nakoupí nový stroj za 1000 EUR s životností 10 let. Při počítání Cash Flow bude tento výdaj tak jak je: 1000 EUR v roce nákupu. V účetnictví bude tento stroj při určení výsledku hospodaření veden pomocí odpisů po dobu 10 let, každý rok budou vedeny náklady ve výši 100 EUR.

9. Kumulovaný peněžní tok je suma příjmů i výdajů všech let investice až do počítaného roku.

Diskontace jednotlivých příjmů a výdajů se vypočítá podle vztahu:

$$dCF_t = \frac{CF_t}{(1+r)^t},$$

kde dCF_t jsou diskontované příjmy či výdaje v roce t ,

CF_t jsou příjmy či výdaje v roce t ,

r je diskontní sazba v daném roce.

Kumulovaný diskontovaný peněžní tok je suma diskontovaných příjmů a výdajů všech let až do počítaného roku.

Čistá současná hodnota investice je suma všech diskontovaných příjmů a výdajů (je rovna hodnotě kumulovaného diskontovaného peněžního toku v posledním roce).

Doba zvratu je čas, kdy hodnota kumulovaného a kumulovaného diskontovaného peněžního toku je rovna 0. Snadno ji určíme např. lineární aproximací.

Vyplněná tabulka:

Rok	Příjmy	Kumulovaný peněžní tok	Diskontované příjmy a výdaje	Kumulovaný diskontovaný peněžní tok
1	0	-500000	-500000	-500000
2	50000	-450000	45455	-454545
3	80000	-370000	66116	-388430
4	100000	-270000	75131	-313298
5	100000	-170000	68301	-244997
6	100000	-70000	62092	-182905
7	100000	30000	56447	-126457
8	100000	130000	51316	-75142
9	100000	230000	46651	-28491
10	100000	330000	42410	13919

NPV = 13 919 eur

Doba zvratu: 6,7 let

Diskontovaná doba zvratu: 9,7 let

Poznámka: Uznávána byla i řešení, který diskontovala už i první (výdajový) rok investice. Obě metody jsou použitelné, závisí pouze na typu zvoleného účetnictví.

10. Jedním z dalších ekonomických ukazatelů investice, který jsme ještě nezmiňovali, je vnitřní výnosové procento (IRR). Ukazuje relativní výnos, který investice přinese během své existence. Je rovna diskontní sazbě, při které je NPV rovna nule (touto úvahou jej můžeme také vypočítat). Snadnější je použít finanční funkci MÍRA.VÝNOSNOSTI v Excelu a získáme IRR = 11 %.

Veškeré investice týkající se chemického průmyslu vykazují velkou míru rizika (změna trhu, politické situace, objev nové technologie apod.), proto se při plánování berou v potaz projekty s vysokou hodnotou NPV. Tato investice těsně dostane NPV do kladných hodnot v posledním roce své existence: stačí malá změna v podmínkách a investice se již nevyplatí. Proto bych tuto investici panu Šmudlovi nedoporučil.

Otázka 1 – 0,5 bodu, 2 – 1 bod, 3 – 1 bod, 4 – 1 bod, 5 – 3 body, 6 – 1 bod, 7 – 1 bod, 8 – 1 bod, 9 – 3 body a 10 – 1,5 bodu. Celkem 14 bodů.

Úloha č. 5: Netřpytí se všechno, co je zlato

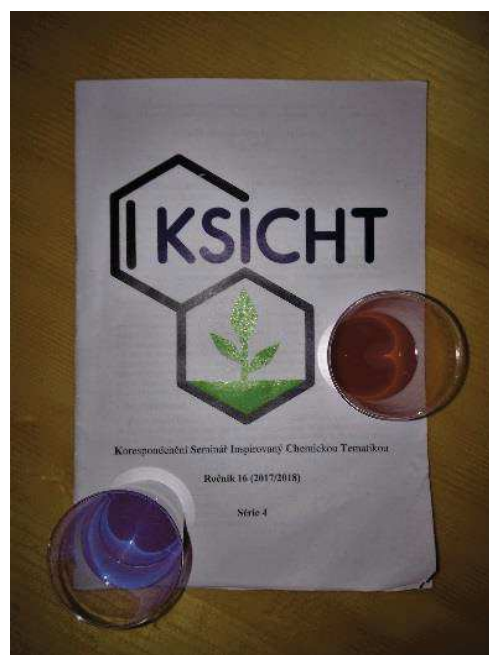
(8 bodů)

Autoři: Michal Řezanka a Jaroslav Grof

1. Dokument se jmenuje bezpečnostní list (material safety data sheet). Najdeme v něm rizikové věty H315, H319, H335 a bezpečnostní oznámení P261, P305 + P351 + P338 (popřípadě i další).
2. Termín „green chemistry“ obecně znamená použití k přírodě šetrných postupů v chemii a jejích aplikacích. Ve vztahu k syntéze nanočástic se má většinou namysli použití přírodních látek jako redukčních (a stabilizačních) činidel.
3. Děkujeme za všechny fotky. Bylo velmi obtížné vybrat jenom dvě:



Petra Pikulová



Marie Grunová

4. Například: Ve skleněné nádobě bylo přivedeno k varu 100 ml vody, do které byl postupně přidán roztok obdrženého KAuCl_4 v 10 ml vody a cca 1/10 tablety vitamínu C (500 mg/tableta). Reakční směs byla dále zahřívána 1 minutu.
5. Zlaté nanočástice pokryté škrobem jsou méně náchylné k agregaci působením zvýšené iontové síly. Škrob nanočástice obalí lépe než nízkomolekulární látky. Agregace zlatých nanočástic je doprovázena změnou barvy z červené přes fialovou do modré nebo vytvořením sraženiny.

Otázka 1 – 0,5 bodu, 2 – 0,5 bodu, 3 – 4 body, 4 – 2 body, 5 – 1 bod. Celkem 8 bodů.

