



Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 21 (2022/2023)

Řešení série 4

Milé řešitelky, milí řešitelé, moc Vám děkujeme za řešení úloh, trpělivost, a že jste s námi vydrželi. Také Vám moc gratulujeme ke skvělým výkonům! Letos máme 63 úspěšných řešitelek a řešitelů, velkou pochvalu si ale zasloužíte úplně všichni. Jsme rádi, že máte zájem o přírodní vědy, přemýšlíte nad opravdovými oříšky a dokážete je rozlousknout.

Anketa

Děkujeme Vám za vyplnění ankety, sešlo se nám rekordních 81 odpovědí. Mnohokrát děkujeme za vaše názory, připomínky i děkovné dopisy. Budeme se i nadále snažit vést KSICHT k vaší spokojenosti.

Na základě vašeho hlasování byl na příští ročník vybrán seriál s názvem Kovy v organické chemii, který pro vás bude psát Honza Hrubeš.

V letošním ročníku se Vám nejvíce líbily úlohy Dentální, Ozonolýza a C3, C4 a CAM nebo snad KAM?

V příštím ročníku zvýšíme koncentraci úloh z organické chemie, zařadíme nějaké praktické úlohy, nezapomeneme na blbinky či šifrovačky a přibrzdíme s fyzikální chemií.

Závěrečné KSICHTí soustředění

Od 11. do 16. června 2023 se v Praze na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy uskuteční KSICHTí soustředění. Na programu budou přednášky z různých oblastí chemie a práce v laboratoři. Laboratorní úlohy se budeme snažit sestavit tak, aby si na své přišel jak začátečník, tak i zkušený chemik. Samozřejmě nebudou chybět ani hry na odreagování. Ubytování a strava budou hrazeny. Máme kapacitu pro 30 účastníků, pokud se vás přihlásí víc, bude rozhodovat počet bodů po čtvrté sérii.

Podrobnosti o soustředění Vám zašleme e-mailem a objeví se na webových stránkách KSICHTu.

Staň se KSICHTím organizátorem!

Pro ty z vás, kteří již teď litují, že se s KSICHTem již víckrát neseťkají, neboť opouštějí řady středoškoláků, máme dobrou zprávu. Stačí se stát KSICHTím organizátorem a KSICHT z vašeho života nezmizí. Co pro to udělat? Kontaktujte nás, 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 může hodit. Už teď se na vaše e-maily a úlohy těšíme.

Přihláška do 22. ročníku KSICHTu

Přihlašování bude spuštěno v průběhu prázdnin, první sérii očekávejte tradičně začátkem října.

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

Vaši KSICHTí organizátoři

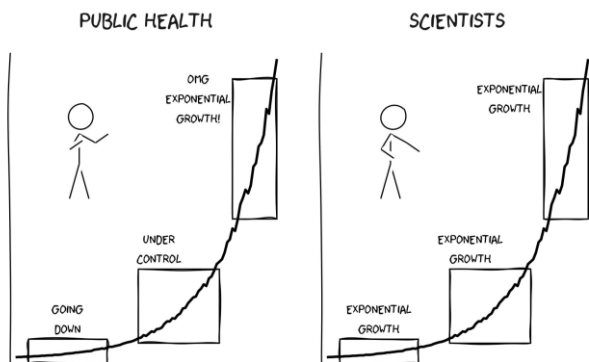
Seriál: Virální chemie

Autoři: Karel Berka, Jakub Krieger, Adam Tywoniak

4. díl: Současná virální chemická témata



V předchozích dílech seriálu jsme se zabývali viry a prostředky boje proti nim. V tomto díle se od medicínské chemie posuneme o dost dále, a to k současným trendům a tématům, která jsou v chemii „virální“, a tedy předmětem rychle rostoucího zájmu. Podobně roste zájem o výsledky moderních technik strojového učení, a tak je jen logické, že ilustrační obrázek k tomuto dílu vygenerovala Midjourney¹ na dotaz: “illustration picture to show virally trending chemical topics”.



Obrázek 1. **Různí lidé často interpretují stejná data různě.** Například exponenciální růst je ve svém počátku poměrně pomalý a pak už bývá pozdě... Zdroj: Jens von Bergmann¹ ve stylu komiksů XKCD¹

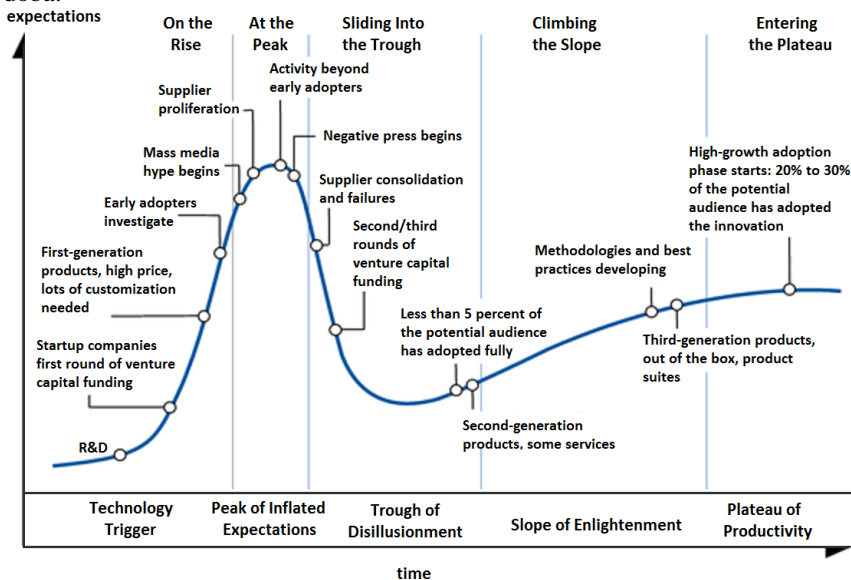
Jak ale vlastně poznat, co bude virálním tématem? Víme, že virální šíření by mělo být exponenciální, ale jak ukazuje obrázek 1, zpočátku i exponenciála roste poměrně pomalu a není snadné ji odlišit od šumu jiných témat, která společnost chvíli zajímají, ale pak zase zapadnou. Akademické prostředí (hlavně světové) je nicméně k virálnímu šíření myšlenek docela

svolné, jednak důsledkem vysoké míry propojení napříč státy a institucemi, a také proto, že absolventi světoznámých univerzit častěji získávají prestižní na dalších univerzitách, takže se pak myšlenky z významných univerzit šíří o to rychleji, když si o nich povídají jejich (bývalí) spolužáci².

¹ <https://discord.gg/midjourney>

² <https://www.chemistryworld.com/news/why-do-some-ideas-go-viral-in-academia/3009781.article>

Každá virální novinka navíc čelí zubu času. Z takzvané hype křivky (obrázek 2), kterou společnost Gartner etablovala pro poradenství a investice v nových technologiích, lze vyčíst, že nejprudší „virální“ šíření povědomí o technologii se objevuje hlavně na začátku (*peak of inflated expectations*). Do úplného zavedení technologie (*plateau of productivity*) může však uplynout ještě poměrně dlouhá doba.



Obrázek 2. **Gartnerovská hype křivka technologií** ukazující postupný vývoj očekávání plynoucích z jednotlivých technologií. Zdroj: Wikipedia³

Ale kde vlastně zjistit, co je aktuálně virální v chemii? Možností je víc: dívat se na nárůsty počtu publikací k tématu⁴ či na citovanost časopisů v jednotlivých oborech⁵, hledání četnosti zmínek na sociálních médiích a stahovanosti článků⁶, případně jejich čtenosti⁷. Dobrým vodítkem jsou také expertní panely vědeckých společností, například ACS⁸ nebo IUPAC⁹ (obrázek 3).

³ https://en.wikipedia.org/wiki/Gartner_hype_cycle#/media/File:Hype-Cycle-General.png

⁴ <https://www.webofscience.com/wos/woscc/basic-search>

⁵ https://scholar.google.cz/citations?view_op=top_venues&hl=en&vq=chm

⁶ <https://www.nature.com/collections/jgiddbdc>

⁷ <https://axial.acs.org/cross-disciplinary-concepts/the-20-most-read-chemistry-articles-of-2022>

⁸ <https://axial.acs.org/cross-disciplinary-concepts/10-hot-topics-in-chemistry-so-far-in-2022>

⁹ <https://www.degruyter.com/document/doi/10.1515/ci-2022-0402/html>



Obrázek 3. Virální témata v chemii roku 2022 dle IUPAC¹¹

Když tyto přístupy zkombinujeme, tak vyjdou nám zejména následující virální témata:

- **Nové materiály**, ať už nanomateriály, nebo návrhy různých funkčních materiálů, pomocí kterých se dá vylepšit nějaká požadovaná vlastnost – energetická hustota systému, jeho pevnost, pružnost, optické vlastnosti, případně i citlivost sensorické metody na analyt a podobně. Možnosti použití pak jsou široké – od přípravy nových senzorů pro životní prostředí či pro sledování zdraví až k energetice, kde probíhá bouřlivý vývoj efektivity solárních článků¹⁰, či k materiálům pro ukládání energie – koncentrátorům, nebo různým variantám baterií (lithiových, průtočných, sodíkových, grafenových, ...).
- **Vakcíny založené na nukleových kyselinách**: po úspěšném nasazení proti COVIDu se tato technologie zdá být vhodnou pro personalizovanou léčbu nádorů¹¹. Cílem této metody je připravit na základě osekvenovaného nádoru vhodnou kombinace antigenů, která má následně vybudit imunitní systém, aby nádor zlikvidoval. A k tomu, aby se imunitní systém pacienta rozkoukal, jsou pak mRNA vakcíny vhodné.

¹⁰ <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>

¹¹ Rojas LA, Sethna Z, Soares KC et al.: Personalized RNA neoantigen vaccines stimulate T cells in pancreatic cancer. *Nature* (2023). <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06063-y>

- **Zpracování oxidu uhličitého**, který je (společně s metanem a vodní parou) jedním z hlavních skleníkových plynů má za cíl tento plyn z atmosféry odstraňovat, nebo ho do něj alespoň dále nevypouštět ve snaze snížit zrychlování změny klimatu. Zachycený oxid uhličitý se dá následně využít pro přípravu budoucích e-paliv nebo i složitějších sloučenin – například léčiv. Probíhá tak intenzivní výzkum potřebných katalyzátorů a neustále se zlepšují jejich parametry, zejména dosažitelná reakční rychlost, a snižuje se i energetická náročnost katalyzovaných reakcí s oxidem uhličitým¹².
- **Robotizace v chemii**: byt' jsou z pohledu mnoha akademiků studenti výbornými roboty použitelnými na mnoho prací v chemické laboratoři, většinou mají problém se značně repetitivními činnostmi. A právě v této oblasti se začíná uplatňovat robotizace: nejprve na přípravu rutinně připravovaných roztoků – pufrů a podobně¹³. V druhém kroku a ve spojení s následujícím bodem pak vývoj směřuje až k automatickému návrhu a provádění experimentů¹⁴ (například pro hledání optimálních podmínek dané syntézy, což je velmi nudná a zdlouhavá, ovšem nutná práce).
- **Použití metod umělé inteligence v chemii**: metody umělé inteligence se poslední dobou rozvíjejí extrémně rychle – vedle MidJourney použitého na ilustrační obrázky se objevily například ChatGPT od OpenAI, Bingbot od Microsoftu nebo Bard od Googlu. Kromě jejich dnes už bohužel možného použití pro psaní protokolů¹⁵ (což bezhlavě nedělejte) se stále více propojují pro zrychlování chemických výpočtů a zlepšování predikcí vlastností mnoha chemických látek.¹⁶

¹² Cheon, J.; Yang, J. Y.; Koper, M.; Ishitani, O. From Pollutant to Chemical Feedstock: Valorizing Carbon Dioxide through Photo- and Electrochemical Processes. *Acc. Chem. Res.* 2022, 55 (7), 931–932. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.2c00129>

¹³ <https://www.chemistryworld.com/features/how-to-automate-your-lab/4016831.article>

¹⁴ Crandall, Z., Basemann, K., Qi, L. & Windus, T. L. Rxn Rover: automation of chemical reactions with user-friendly, modular software. *React. Chem. Eng.* 7, 416–428 (2022). <https://doi.org/10.1039/D1RE00265A>

¹⁵ Humphry T, Fuller AL: Potential ChatGPT Use in Undergraduate Chemistry Laboratories *J. Chem. Educ.* 2023, 100, 4, 1434–1436

<https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.3c00006>,

Barbatti, M. Scientific authorship in the time of ChatGPT. *Chemistry World* <https://chemistryworld.com/opinion/scientific-authorship-in-the-time-of-chatgpt/4017232.article>

¹⁶ Keith JA et al: Combining Machine Learning and Computational Chemistry for Predictive Insights Into Chemical Systems. *Chem. Rev.* 2021, 121, 16, 9816–9872 doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00107

Závěr:

Doufáme, že se Vám letošní seriál o virové chemii, nahlížen z různých úhlů pohledu, líbil, byť byl sám virovými chorobami autorů poznamenán. Pokud byste chtěli nakouknout, jaká témata jsou „virální“ v aktuální české chemii, nabízíme Vám ke zhlédnutí (nejen) letošní přednášky nositelů grantů GAČR Junior Star v rámci Vědeckého semináře¹⁷ pořádaného každoročně Karlem Berkou a dostupného na YouTube katedry fyzikální chemie UP. Tyto granty jsou udělovány excelentním začínajícím vědcům do 8 let od získání titulu Ph.D. Díky pětiletému projektu a štědré finanční podpoře získávají laureáti možnost se vědecky osamostatnit a případně založit i vlastní výzkumnou skupinu, která může do české vědy přinést nová vědecká témata. Na podporu dosáhne pouze zlomek podaných projektů, a o to víc potěší, že jsou mezi nimi zastoupeni i KSICHTáci a KSICHTačky¹⁸. Třeba mezi nimi budete jednou taky. Přejeme dobré vysvědčení a hezké prázdniny!



“Chemical robot waving farewell to small bunny” by Midjourney AI

¹⁷ https://youtube.com/playlist?list=PLRGiGr8c-LJIIXSAcpL_60urC-bg-Ofg

¹⁸ <https://gacr.cz/seznam-junior-star/>

Řešení úloh 4. série 21. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Virální

(8 bodů)

Autor: Tomáš Heger

1. a) Dobrý modelový organismus se pozná podle některých z těchto vlastností:

- má rychlý a krátký životní cyklus – rychle se rozmnoží a vytvoří novou generaci,
- tvoří větší množství potomků – rychle získáme rozumný statistický vzorek,
- má „jednoduchou“ a reprezentativní genetickou informaci, takže ho můžeme považovat za vhodnou aproximaci i pro jiné příbuzné druhy,
- je poměrně nenáročný na získání a pěstování/chov (ekonomicky i biochemicky).

Příklady modelových organismů zahrnují například právě bakterii *Escherichia coli*, rostlinku huseníček rolní (*Arabidopsis thaliana*), kvasinku pivní (*Saccharomyces cerevisiae*) či „červíka“ (roupa) háďátka obecné (*Caenorhabditis elegans*), myš domácí (*Mus musculus*), a podobně. To všechno jsou velmi často používané druhy.

b) Vyhledávání na UniProtu vypisuje 276 proteinů, které jsou součástí viru. Je ale nutné počítat s určitou odchylkou, neboť je možné, že některé výsledky vyhledávání se budou překrývat (například proteinové komplexy vypsané samostatně po podjednotkách) a anotace u některých proteinů je neúplná a prostě označená jako „*phage protein*“. *Poznámka: Tolerance výsledků byla mezi 250 až 300 proteiny.*

2. a) *Long tail fibres* se k povrchu bakterie vážou pomocí interakcí s lipopolysacharidy nebo s proteinem jménem porin C.

b) Požadované mutace jednak zbavily *E. coli* proteinu porin C a jednak pozměnily povrch lipopolysacharidů, přes které se *long tail fibres* váží.

3. a) Stažitelný krček se naváže na konkrétní receptor v membráně (již dříve zmíněný porin C) a přes něj také prochází mechanicky skrz.

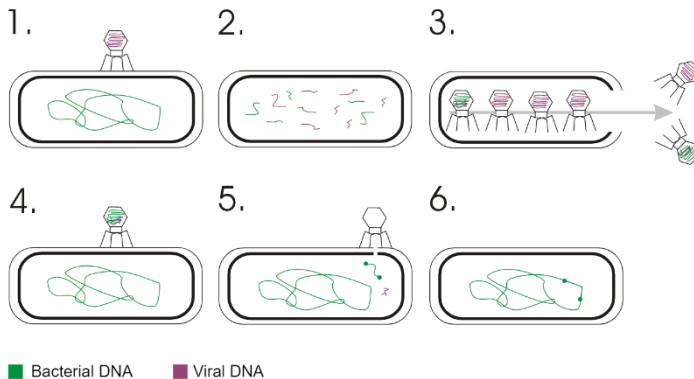
b) Pokud stažitelný krček narazí na buněčnou stěnu, virus ji hydrolyzuje, čímž ji v daném místě rozpustí a umožní krčku proniknout skrz.

4. Logická úvaha nám velí, že bychom se měli podívat především na velikost, tvar a elektrostatiku krčku. Velikost je jasná – krček musí mít dostatečný průměr, aby skrze něj prošla dvoušroubovice DNA uvolňovaná z kapsidových proteinů.

Tvar trubice je pak vcelku zřejmou optimalizací. Tato data nám napovídají, že nebude stačit jen „nějaký“ jednoduchý helix, ale že budeme muset vytvořit válcovou strukturu krčku z několika menších proteinů.

Co se týče náboje, DNA obsahuje mnoho záporně nabitých fosfátových zbytků; proto by hypoteticky dávalo smysl, aby krček měl ve vnitřní stěně rozmístěné polární zbytky aminokyselin s negativním či spíše parciálně negativním nábojem, které by elektrostatickými interakcemi usnadnily jeho pohyb a odpuzovaly DNA od toho, aby se vážala ke vnitřní struktuře krčku. Zároveň by se asi hodily kladně nabitě zbytky u vrcholu krčku, aby byla DNA přitahována dovnitř.

5. Odpověď může být inspirována například experimentem z roku 1952 známým jako Hersheyův–Chaseové experiment. V něm bylo použito radioaktivní izotopové značení, jednak fosforu v nukleových kyselinách (DNA), jednak síry v proteinech (Cys, Met). Toto značení bylo aplikováno na bakteriofág, který byl poté ponechán, aby se rozmnožil. Buňka infikovaná bakteriofágy byla následně proměřena právě na toto značení. Pokud se informace do nové generace má přenášet pomocí proteinů, měla být v buňce zaznamenána radioaktivní síra, pokud informaci nesou nukleové kyseliny, v buňkách alespoň části potomků měl být nalezen radioaktivní fosfor. Aktivita fosforu byla na rozdíl od síry skutečně zaznamenána, a bylo tedy prokázáno, že informaci skutečně nesou nukleové kyseliny. Jiné rozumně založené a vysvětlené experimenty byly také uznány jako správné řešení.
6. Z nabízených látek by mohl hypoteticky pomoci pouze foskarnet, u kterého byl prokázán vliv na některé mutace viru T4. Jelikož tento lék cílí především na DNA polymerázu, která je napříč viry velmi podobná, jeho účinnost dává smysl. Ostatní látky buď cílí na takové molekuly, které se v T4 viru nenachází, nebo působí jako stimulanty eukaryotické buňky mnohobuněčného organismu. Hodně se objevovala odpověď entecavir, ale ten je specificky výběrový na viry způsobující hepatitis, a nepodařilo se prokázat, že by měl fungovat na jiné viry napadající eukaryoty, natož prokaryoty.
7. Bakterie mohou použít napadení některými bakteriofágy jako cestu k horizontálnímu přenosu genové informace. Může se totiž stát, že bakteriofág, který se skládá v napadené bakterii, si místo své DNA omylem vezme bakteriální informaci, a tu poté bude dále šířit napadením jiné bakterie (viz obrázek). Nikdy ale nebylo pozorováno, že by tento mechanismus takzvané transdukce umožňovaly nativní T4 viry.



Obrázek 1: Mechanismus transdukčního přenosu DNA

8. Cidofovir je (jak název napovídá) složitějším derivátem cytosinu, je tedy nejsnazší vyjít právě z něj. Co se derivátů fosforečné kyseliny týče, při většině syntetických postupů se využívá (diethoxyphosphoryl)methyl- 4-tosyl. Obecně by to měl být takový derivát, který má jako postranní řetězce dvě ethylové skupiny a jednu methylovou skupinu, nejlépe s nějakým chránícím řetězcem.
9. Adenosintrifosfát – ATP.
10. Jakákoliv rozumná odpověď se počítá. Vybrané zasláné ukázky jsou přiložené níže. Prvně vidíme „virovou mapu“ od Emy Kerlikové a pod ní „bakteriofága v laborce“ od Hany Panchártkové. Z textového AI generátoru od Daniele Žáka přišel následující vtíp (vtipnost nechám na posouzení čtenáře):

Three viruses, Influenza, Rhinovirus, and Coronavirus, walk into a doctor's office. The doctor takes one look at them and says, "What brings you three here?"

Influenza steps forward and says, "I'm feeling feverish and achy all over. I think I might have the flu."

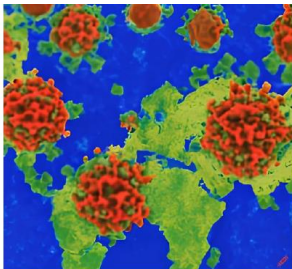
Rhinovirus nods and adds, "I've got a stuffy nose and a sore throat. I think I might have a cold."

Coronavirus looks around and says, "I don't really have any symptoms, but I heard this is the place to be if you want to get attention."

The doctor sighs and shakes his head. "Well, Influenza and Rhinovirus, I can prescribe you some medication to help ease your symptoms. But as for you, Coronavirus, you need to go quarantine yourself and stop spreading around."

Coronavirus pouts and mutters, "But I just wanted to be popular like my other virus friends."

The doctor rolls his eyes and says, "Well, you've certainly achieved that. But popularity isn't always a good thing when it comes to viruses."



Jedná se o úvodní scénu dalšího katastrofického filmu, ve kterém lidstvo stojí na prahu zániku. Konkrétně je zde ukázáno, že hrozbou přicházející z vesmíru nejsou nepřátelští mimozemšťani, ale vraždící virus.



Otázka 1 – 1 bod, 2 – 1 bod, 3 – 0,5 bodu, 4 – 1 bod, 5 – 1 bod, 6 – 1,5 bodů, 7 – 0,5 bodu, 8 – 0,75 bodu, 9 – 0,25 bodu, 10 – 0,5 bodu. Celkem 8 bodů.

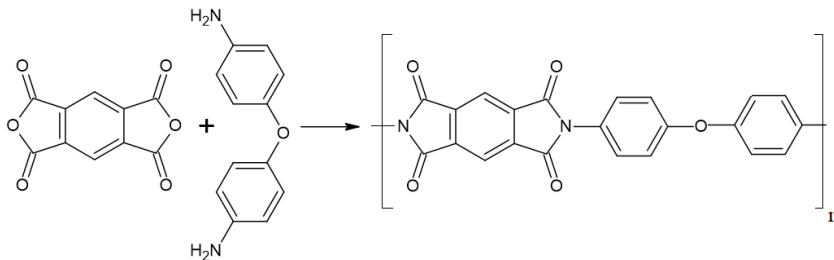
Úloha č. 2 Raketová**(9 bodů)**

Autor: Tomáš Albert Štefanov

1. Materiál sa volá kapton, kaptonová fólia a bol vyvinutý firmou Dupont. Jedná sa o polyimidovú fóliu pokrytú tenkou kovovou vrstvou (hliník, zlato...). Používa sa ako tepelná ochrana lunárneho modulu, hlavne spodnej časti s palivovými nádržami. Namiesto ťažkých tepelných štítov je spodná polovica modulu zabalená v 25tich vrstvách ľahkej kaptonovej fólie, ktoré tepelne chránia modul pred výkyvmi teplôt ktorým je vystavený.

Zlato vykazuje jednu z najvyšších reflektancií v IČ oblasti. To je dôvod, prečo niektoré fólie boli pokrývané zlatom, avšak zvyčajne sa vyrábajú v lacnejšom hliníkovom prevedení. Rovnako samotný polymér má jantárovú farbu a pri pokrytí hliníkom sa javí zlatkavý.

2. Majoritná polymérna zložka je samozrejme kapton. Mylar (fólia na báze PET) bola taktiež používaná avšak majoritne ako izolácia na veliteľskom module.



3. Určíme si objem vydýchaného vzduchu za celú dobu expedície:

$$V_{Vz} = N_{\text{nád./deň}} \cdot V_{\text{nád.}} \cdot N_{\text{os.}} \cdot N_{\text{dni}} = 16 \cdot 60 \cdot 24 \cdot 0,0005 \cdot 3 \cdot 12 = 414,72 \text{ m}^3$$

Vypočítame objem čistého CO₂ :

$$V_{\text{CO}_2} = V_{Vz} \cdot \varphi_{\text{CO}_2} = 414,72 \cdot 0,05 = 20,736 \text{ m}^3$$

Prevedieme si tlak a teplotu na SI: 14,7 PSI = 101353 Pa; 68 °F = 293,15 K

Z rovnice ideálneho plynu vypočítame počet molov CO₂: (Nestačí použiť V_M = 22,4 dm³ mol⁻¹, pretože naše podmienky nie sú štandardné, máme iný tlak a teplotu. Pri zanedbaní vnesieme do výsledku takmer 7% chybu!)

$$n_{\text{CO}_2} = \frac{pV_{\text{CO}_2}}{RT} = \frac{101353 \cdot 20,736}{8,3145 \cdot 293,15} = 862,25 \text{ mol}$$

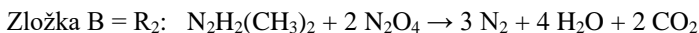
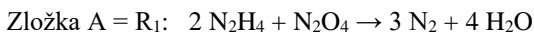
LiOH reaguje s CO₂ v molárnom pomere 2:1. Výsledná hmotnosť LiOH bude teda:

$$m_{\text{LiOH}} = 2n_{\text{CO}_2}M_{\text{LiOH}} = 2 \cdot 862,25 \cdot 23,95 \cdot 10^{-3} = 41,30 \text{ kg}$$

4. Hypergolická pohonná látka je kombinácia raketového paliva a oxidovadla, ktorá sa pri vzájomnom kontakte spontánne vznieti a nepotrebuje zažihávať ani v priebehu horenia. Motory na tento druh propelantov sú veľmi jednoduché nakoľko nemusia obsahovať čerpadlá ani zapaľovače. Často ide o korozívne a toxické látky.

Medzi ďalšie kombinácie okrem kombinácie Aerozinu 50 a N_2O_4 poznáme napr.: nesymetrický dimethylhydrazín + N_2O_4 ; anilín + HNO_3 ; terpentín + IRFNA; petrolej + konc. H_2O_2 ... príkladov existuje veľa...

5. Zložky Aerozinu 50 sú hydrazín (látka A, menšia molárna hmotnosť, vid' poznámka v tab. 1) a 1,1-dimethylhydrazín (látka B)



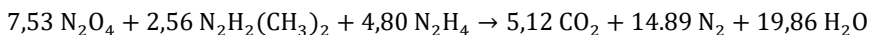
6. Vieme, že jednotlivé zložky reagujú s N_2O_4 v stechiometrických pomeroch z úlohy 4. Potrebujeme zistiť v akom stechiometrickom pomere sú tieto 2 zložky Aerozinu voči sebe. Pre hmotnostný pomer 1:1 dostávame molárny pomer B:A ako $1:(M_B/M_A)$ a teda 1 mol B : 1,875 molom A.

$$B:A = 1: \frac{M_B}{M_A} = 1:1,875$$

Celkovú reakciu môžeme vyjadriť ako súčet čiastkových reakcií jednotlivých zložiek v ich molárnom pomere:

$R_3 = R_2 + 0.9375 \cdot R_1$ (pozor R_1 je vzťahnutá na 2 moly hydrazínu!) a teda aj celkovú reakčnú entalpiu ako $\Delta H^\circ_{R_3} = \Delta H^\circ_{R_2} + 1.875 \cdot \Delta H^\circ_{R_1}$ pričom $\Delta H^\circ_{R_2}$ a $\Delta H^\circ_{R_1}$ sú vzťahnuté na jeden mol látky B resp. A!

Celková rovnica vzťahnutá na 1kg reaktantov bude potom :



Z pomocou hodnôt z tabuľky 1 vypočítame

$$\Delta H^\circ_{R_1} = -524,51 \text{ kJ/1 mol A}$$

$$\Delta H^\circ_{R_2} = -1763,54 \text{ kJ/1 mol B a}$$

$$\Delta H^\circ_{R_3} = -2746,99 \text{ kJ/1 mol B, 1,875 mol A a 2,9375 mol } N_2O_4 \text{ resp.}$$

$$\Delta H^\circ_{R_3} = -2747 \text{ kJ/0,3905 kg reakčnej zmesi (} m_P \text{)}.$$

Hodnota mernej entalpie reakcie bude potom $h^\circ_R = -7035,2 \text{ kJ/kg } m_P$

Prípadne by sa dala bilancovať priamo celková rovnica vzťahnutá na 1 kg reaktantov, výsledok bude rovnaký.

7. Ako prvé si vyjadríme strednú hmotnosť ako funkciu m_p . Hmotnosť stupňa, astronautov, skafandrov a hornín je konštantná a činí 2540 kg. Z definície strednej hmotnosti dostaneme:

$$m = 2540 + \frac{1}{2}m_p$$

Ďalej potrebujeme vypočítať zmenu potenciálnej a kinetickej energie. Zmenu potenciálnej energie dostaneme zo vzťahu pre potenciálnu energiu v gravitačnom poli. Pozor, nestačí použiť staré známe $E_p = mgh$ pretože g sa s výškou zmení. Hmotnosť mesiaca $M = 7,3477 \cdot 10^{22}$ kg a polomer $R = 1737$ km. G je gravitačná konštanta $6,67 \cdot 10^{-11}$ m³ kg⁻¹ s⁻². Výšku h nad povrchom máme zadanú 110 km.

$$\Delta E_p = -GmM \left(\frac{1}{R+h} - \frac{1}{R} \right)$$

Zmenu kinetickej energie spočítame jako:

$$\Delta E_k = \frac{1}{2}mv_r^2 \quad v_r = \sqrt{\frac{GM}{R+h}}$$

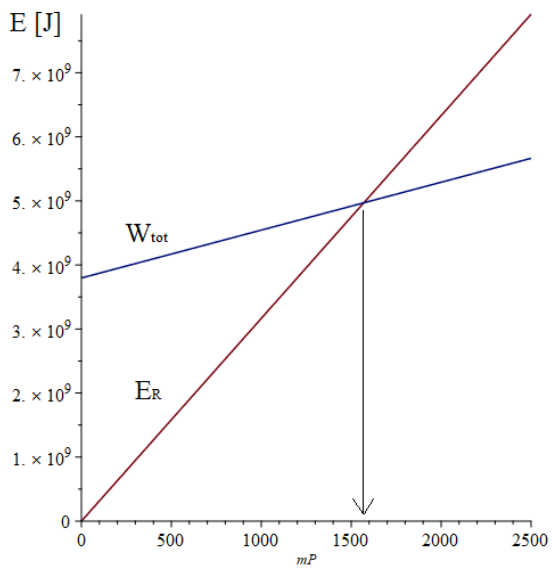
kde v_r je orbitálna rýchlosť na orbite s polomerom $R+h$. V našom prípade sa $\Delta E_k = E_k$ pretože naša počiatočná rýchlosť je nulová. Ich súčtom a vyčíslením známych konštánt dostaneme lineárnu závislosť práce potrebnej na vynesenie modulu na obežnú dráhu mesiaca:

$$W_{\text{tot}} = \Delta E_p + \Delta E_k = 3,79669 \cdot 10^9 + 747379,8 m_p$$

Energiu na vykonanie tejto práce získavame z raketového paliva podľa rovnice:

$$E_R = -h_R^\circ m_p \eta = 3165840 m_p$$

Riešenie hľadáme ako $E_R = W_{\text{tot}}$ a dostaneme $m_p = 1570$ kg. Na obrázku vidíme grafické riešenie tohoto problému.



Otázka 1 – 1 bod, 2 – 1 bod, 3 – 1,5 bodu, 4 – 1 bod, 5 – 1 bod, 6 – 1,5 bodů, 7 – 2 body. Celkem 9 bodů.

Úloha č. 3: Zdeněk a holky**(10 bodů)**

Autorka: Karolína Zemene

1. a) 1. řád – jelikož dívky jsou přitahovány Zdeňkem samy o sobě, čím víc jich na táboře bude, tím více bude mít Zdeněk vztahů
 - b) 0. řád – i když na tábor přijede více dívek, Zdeněk zvládne balit vždy jen jednu, a proto to rychlost reakce neovlivní
 - c) 2. řád – čím více bude na táboře dívek, tím více bude vztahů, a čím více chlapců, tím také více vztahů, tedy rychlost reakce záleží na počtu obou pohlaví
2. Množství lze vyjádřit v dívkách, což je v tomto případě lepší jednotka než moly, která je pro tyto účely zbytečně velká. Čas pro sbalení dívek je oproti tomu poměrně velký, a proto jsou preferovanými jednotkami hodiny nebo dny.
 - a) h^{-1} , nebo den^{-1}
 - b) dívka h^{-1} , dívka den^{-1}
 - c) dívka $^{-1}$ h^{-1} , dívka $^{-1}$ den^{-1} , chlapec $^{-1}$ h^{-1} , chlapec $^{-1}$ den^{-1}
 3. Nejprve je potřeba spočítat rychlostní konstantu dané reakce na základě údajů o Zdeňkovi z prvního dne. Dle 1a) jde o reakci prvního řádu. Tu můžeme vyjádřit rovnicí ve tvaru $D = D_0 \cdot e^{-kt}$. Jelikož reakce běží ve směru nesbalené dívky \rightarrow sbalené dívky, značí D počet nezadaných dívek a D_0 počet všech dívek na táboře. Odtud:

$$k = \frac{-\ln\left(\frac{D}{D_0}\right)}{t} = \frac{-\ln\left(\frac{69}{72}\right)}{1} = 0,0462 \text{ den}^{-1}$$

Nyní můžeme využít vzoreček pro poločas reakce pro reakci prvního řádu:

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln(2)}{k} = \frac{\ln(2)}{0,0462} = 17 \text{ dní}$$

Alternativně bychom mohli do výše uvedené rovnice dosadit $D(t) = 0,5D_0$; tento postup vede na stejný výsledek a lze tak odvodit výraz pro reakční poločas. Zdeněk by potřeboval na sbalení poloviny účastnic 17 dní, což vzhledem k délce trvání tábora (14 dnů) nestihně.

4. Úlohu řeší dosazení do rovnice z příkladu 3; dívky D jsou v tomto případě nahrazeny muži M a rychlostní konstanta je $5\times$ menší

$$M = M_0 \cdot e^{-kt} = 12 \cdot e^{-0,008512 \cdot 11} = 11 \text{ mužů}$$

11 mužů zůstalo nezadaných, Zdeněk si tedy dal pusu s jedním mužem.

5. Necht' k_f je rychlostní konstanta reakce vzniku Zdeňkova vztahu a k_{-f} je rychlostní konstanta reakce rozchodu Zdeňka a dívky.

a) Rychlostní rovnice vzniku Zdeňkova vztahu: $v = k_1 \cdot D_{\text{nezadané}}$

Rychlostní rovnice zániku Zdeňkova vztahu: $v = k_{-1} \cdot D_{\text{zadané se Zdeňkem}}$

Celková rychlostní rovnice pro změnu Zdeňkových vztahů:

$$v = k_1 \cdot D_{\text{nezadané}} - k_{-1} \cdot D_{\text{zadané se Zdeňkem}}$$

- b) Pokud nás zajímá počet dlouhodobě udržovaných vztahů, necháme systém dospět do rovnováhy. To znamená, že dívky se se Zdeňkem budou rozcházet stejně rychle, jako je bude balit, anebo také rychlost změny počtu Zdeňkových vztahů je nulová. To znamená, že

$$k_1 \cdot D_{\text{nezadané}} = k_{-1} \cdot D_{\text{zadané se Zdeňkem}}$$

$$\frac{k_1}{k_{-1}} = \frac{D_{\text{zadané se Zdeňkem}}}{D_{\text{nezadané}}}$$

Jelikož známe počet dívek na táboře (72), je zřejmé, že

$$D_{\text{nezadané}} = 72 - D_{\text{zadané se Zdeňkem}}, \text{ a proto:}$$

$$\frac{k_1}{k_{-1}} = \frac{D_{\text{zadané se Zdeňkem}}}{72 - D_{\text{zadané se Zdeňkem}}}$$

$$D_{\text{zadané se Zdeňkem}} = \frac{72 \cdot \frac{k_1}{k_{-1}}}{1 + \frac{k_1}{k_{-1}}} = \frac{72 \cdot \frac{0,0462}{1,48}}{1 + \frac{0,0462}{1,48}} = 2 \text{ dívky}$$

Dlouhodobě je Zdeněk schopen udržet jen 2 paralelní vztahy.

6. Potřebné údaje z tabulek: malý panák = 20 mL, hustota 100% ethanolu = 789,3 kg m⁻³

$$V_{100\% \text{ ethanol}} = V_{\text{panák}} \cdot 0,4$$

$$m_{100\% \text{ ethanol}} = V_{\text{panák}} \cdot 0,4 \cdot \rho_{\text{ethanol}}$$

$$n_{100\% \text{ ethanol}} = \frac{V_{\text{panák}} \cdot 0,4 \cdot \rho_{\text{ethanol}}}{M_{\text{ethanol}}}$$

$$N_{100\% \text{ ethanol}} = \frac{V_{\text{panák}} \cdot 0,4 \cdot \rho_{\text{ethanol}}}{M_{\text{ethanol}}} \cdot N_A = \frac{0,02 \cdot 0,4 \cdot 789,3}{46,07} \cdot 6,022 \cdot 10^{23}$$

$$= 8,254 \cdot 10^{22} \text{ částic}$$

7. Ze známých údajů o Zdeňkových vztazích mimo diskotéku nejdříve pomocí Arrheniovy rovnice spočítáme předexponenciální faktor:

$$k_1 = A \cdot e^{-\frac{Ea}{RT_1}}$$

$$A = \frac{k_1}{e^{-\frac{Ea}{RT_1}}} = \frac{2}{e^{-\frac{5000}{8,314 \cdot 293,2}}} = 15,554 \frac{\text{dívěk}}{\text{den}}$$

Nyní dosadíme do Arrheniovy rovnice údaje o druhé situaci, tedy vyšší termodynamickou teplotu 305,2 K, aktivační energii sniženou o energii v n panáčích s N molekulami ethanolu (přečtenou na jouly), a vyšší rychlostní konstantu. Z této rovnice poté vyjádříme počet panáčů.

$$k_2 = A \cdot e^{-\frac{Ea - n \cdot E_{\text{molekula EtOH}} \cdot N_{\text{EtOH v panáku}}}{RT_2}}$$

$$n = \frac{Ea + \ln\left(\frac{k_2}{A}\right) \cdot R \cdot T_2}{E_{\text{molekula EtOH}} \cdot N_{\text{EtOH v panáku}}} = \frac{5000 + \ln\left(\frac{10}{15,554}\right) \cdot 8,314 \cdot 305,2}{0,04191 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \cdot 15,554} = 7$$

Zdeňěk musí dívkám nalít 7 panáčů, aby byly dostatečně omámené na to, aby jich sbalil 10 za den.

8. Nejprve odečteme všechny čas, kdy se Zdeňěk nevěnuje balení, a spočítáme, kolik času Zdeňěk na táboře věnoval balení:

$$t_{\text{balení denně}} = 14 \cdot \left(24 - \left(8 + 6 + 1 + \frac{1}{4}\right)\right) = \frac{245}{2} \text{ h}$$

Na diskotéce a mimo diskotéku tedy Zdeňěk strávil:

$$t_{\text{diskotéka}} = 3 \cdot 5 = 15 \text{ h}$$

$$t_{\text{mimo diskotéku}} = \frac{245}{2} - 15 = \frac{215}{2} \text{ h}$$

Tedy už pouze vynásobíme rychlostní konstantu časem a po upravení jednotek získáme výsledek. Toto je možné pouze v případě reakce 0. řádu.

$$n_{\text{dívěk}} = t_{\text{diskotéka}} \cdot k_1 + t_{\text{mimo diskotéku}} \cdot k_2 = \frac{15}{24} \cdot 10 + \frac{215}{2 \cdot 24} \cdot 2 = 15 \text{ dívek}$$

9. Děkujeme za vaše úžasné výtvary! Libovolná báseň byla uznána jako řešení úlohy. Některé nejzdařilejší výtvary si můžete přečíst níže:

Zrádným šarmem a s dokonalou tváří,
Koho si umane, toho také sbalí,
Kluky, holky v mládí i stáří,
V oboru smilstva byl odjakživa znalý.

Svémi výkony sklízí věčný obdiv,
Avšak něco mu uniká:

I přes všechny ty noci a horká těla,
Žádná mu v mysli neutkvěla,
A pravou lásku nepozná.

Co vede duši,
K touze po věčné rozkoši,
A k životu bohémскому?

Mikuláš Čech

Zdeněk v balení žien ozaj žiadnu konkurenciu nemá,
pochybujem ale, že si pamätá svojich čajok mená.
Je však takej, čo má záujem o takú lásku úbohú ?
Zdeno je strata času, prejdem radšej na ďalšiu úlohu.

Kludia Sýkorová

Zdeněk byl chlapec chytrý, milý,
Pomoc s randěním hledal v chemii.
Celý den psal si rovnice, vzorce,
Aby byl na party za velkého borce.
Když to s dívkami nešlo, po alkoholu sáhl,
Nebo po nejbližším chlapci se natáhl.

Jednoho dne však šarm jeho vypršel,
A Zdeněk sám z diskotéky odešel.
Vrátil se ke své prvotní bohyni,
studoval už jen svou milou chemii.

Kristýna Havrdová

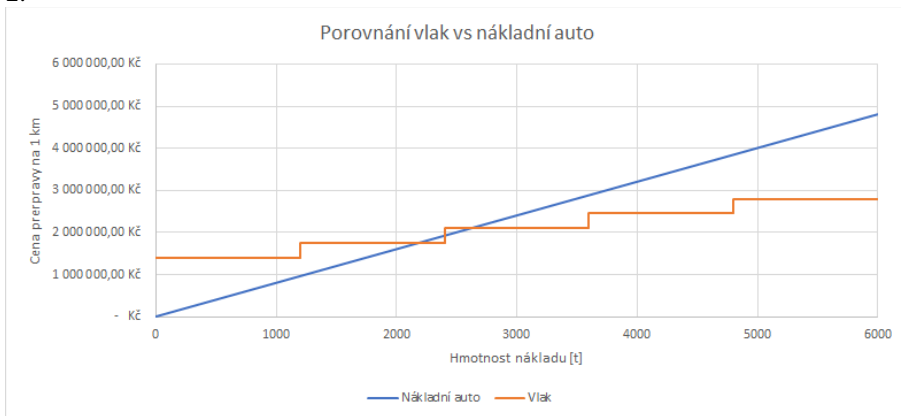
Otázka 1 – 0,5 bodu, 2 – 0,5 bodu, 3 – 1 bod, 4 – 0,75 bodu, 5 – 1,5 bodu, 6 – 1,5 bodu, 7 – 2 body, 8 – 1 bod, 9 – 0,25 bodu. Celkem 9 bodů.

Úloha č. 4: Optimalizační, část II.**(11 bodů)**

Autoři: Jan Stoklasa a Jakub Krieger

1. Vyřešená tabulka je na odkazu pod čarou.¹⁹

2.



Na grafu byly hodnoceny tyto aspekty: křivka vlaku je na nějakém úseku konstantní; křivka vlaku má schodovitý charakter; křivka nákladního auta je přímka, označení os a správné určení intervalů:

Množství nákladu (t)	Výhodnější způsob
0–2125	Silnice
2125–2400	Železnice
2400–2563	silnice
> 2625	železnice

3. Dle předchozí tabulky je výhodnější odvést 450 tun pomocí silniční přepravy, zatímco 4500 tun po železnici. S méně častou přepravou se však váží náklady na skladování, které v této úloze zanedbáváme, i když ve skutečnosti dosahují značných hodnot. Navíc s rostoucím počtem dnů, po kterou dopravu budeme provozovat, budou fixní náklady na železnici méně podstatné.

Úlohu bylo ovšem možné vyřešit i bez grafu výpočty (v nich t značí cenu za transport, sil. je silniční doprava, žel. je železniční doprava).

¹⁹ <https://ksicht.natur.cuni.cz/optimalizacni/>. Jsou zde i řešení úkolů 2, 3 a 8.

Pro 450 t:

$$t(\text{sil.}) = 0,8 \text{ Kč} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{km}^{-1} \cdot 270 \text{ km} \cdot 450\,000 \text{ kg} = 97,2 \cdot 10^6 \text{ Kč}$$

$$t(\text{žel.}) = (10^6 \text{ Kč} \cdot \text{km}^{-1} + 350\,000 \text{ Kč} \cdot \text{km}^{-1}) \cdot 270 \text{ km} = 364,5 \cdot 10^6 \text{ Kč}$$

Pro 4500 t (zde je potřeba vypravit 4 vlaky):

$$t(\text{sil.}) = 0,8 \text{ Kč} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{km}^{-1} \cdot 270 \text{ km} \cdot 450\,000 \text{ kg} = 972 \cdot 10^6 \text{ Kč}$$

$$t(\text{žel.}) = (10^6 \text{ Kč} \cdot \text{km}^{-1} + 4 \cdot 350\,000 \text{ Kč} \cdot \text{km}^{-1}) \cdot 270 \text{ km} = 648 \cdot 10^6 \text{ Kč}$$

4. NH_3 a H_2SO_4 .

5. Proces 4 musí být před procesem 3 a procesy 5, 4 a 2 musí být před procesem 1. Možné pořadí je například 5–4–2–3–1. Procesy 5, 4 a 2 nemohou mít žádnou poptávku z vlastní výroby, protože žádný z jejich produktů nelze použít jako výchozí látku pro další procesy. Proto lze u produktů reakcí 5, 4 a 2 jednoznačně doplnit tabulku poptávek (*samými nulami!*). Až po optimalizaci procesů 5, 4 a 2 lze doplnit poptávku po vlastní výrobě pro procesy 1 a 3.

6. Použijeme vzoreček pro výpočet ze stechiometrické rovnice:

$$m(A) = \frac{a M(A)}{b M(B)} m(B) \text{ nebo trojčlenku.}$$

$$\text{a) } m(\text{NaCl}) = 50 \text{ tun} \cdot \frac{58,4400 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{105,9888 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \cdot \frac{2}{1} = 55,1 \text{ tun}$$

$$\text{b) } m(\text{NH}_4\text{Cl}) = 39 \text{ tun} \cdot \frac{58,4400 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{53,4910 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \cdot \frac{2}{2} = 42,6 \text{ tun}$$

$$7. \text{ Poměr výchozích látek} = \frac{55,1 \text{ tun}}{42,6 \text{ tun}} = 1,29$$

8. Vyřešená tabulka je na odkazu zde: <https://bit.ly/3k5tG1F>.

Problém, který se snažíme vyřešit, má velké množství řešení a rádi bychom podotknuli, že postup optimalizace jednotlivých provozů nevede ke globálnímu optimu. Děje se tak kvůli vlastní výrobě, která jednotlivé proměnné zbavuje vzájemné nezávislosti. Kdybychom například do poptávky Unipetrolu Litvínov po Na_2CO_3 dali „0“, tak sice vyjde vyšší zisk u procesu 5, ale sníží se zisk z procesu 1, protože uберeme „poptávku“ po vlastní výrobě.

Jednoznačně lze vyřešit optimalizaci každého procesu zvlášť; v takovém případě vychází celkový zisk 95,9 mil. Kč/den. Jedenácti z Vás se ovšem podařilo najít kombinaci, jejíž celkový zisk je vyšší: 98,9 mil. Kč/den, a o níž si myslíme, že je to globální optimum.

Častou příčinou ztroskotání bylo psaní čísel do vzorců v uvozovkách. Excel „1“ interpretuje nikoliv jako číslo jedna, ale jako text. To pak způsobí problém v dalších vzorcích, které očekávají jako vstup číslo, nikoliv text.

Pár z Vás zneužil chybu v políčku F10 ve Výrobě 2. Po vyplnění 1 do vlastní výroby procesu 2 jste získali zisky, které byste nijak získat neměli, protože HNO_3 není vstupní látkou do žádného z vašich procesů. Neoprávněné zisky jsme Vám odečetli.

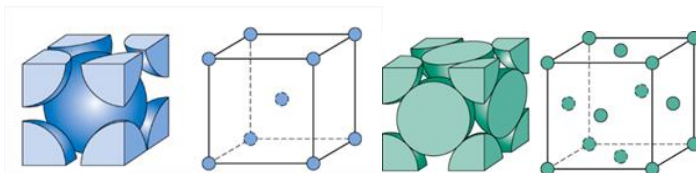
Totální optimalizace byla hodnocena úměrně dosaženému podílu z optimálního zisku (tedy z 98,9 mil. Kč/den).

Otázka 1 – 2,5 bodu, 2 – 1,5 bodu, 3 – 0,5 bodu, 4 – 0,25 bodu, 5 – 0,5 bodu, 6 – 1 bod, 7 – 0,5 bodu, 8 – 4,25 bodu. Celkem 11 bodů.

Úloha č. 5: Povrchní**(16 bodů)**

Autorka: Miroslava Novoveská

1. Prostorově centrovaná elementární buňka obsahuje jeden atom uprostřed a jeden atom v každém rohu (zasahující dovnitř z 1/8) – tedy dva celé atomy, které se dotýkají podél tělesových úhlopříček. Plošně centrovaná elementární buňka obsahuje jeden atom uprostřed každé stěny (zasahující dovnitř z 1/2) a jeden atom v každém rohu (zasahující z 1/8) – tedy čtyři celé atomy, které se dotýkají podél stěnových úhlopříček. Koordinační číslo atomů je 8 u prostorově centrované struktury (4 ve vrstvě nad a 4 ve vrstvě pod) a 12 u plošně centrované struktury (4 ve vrstvě nad, 4 ve stejné vrstvě a 4 ve vrstvě pod).



Obrázek 1: Prostorově (vlevo) a plošně (vpravo) centrovaná elementární buňka²⁰

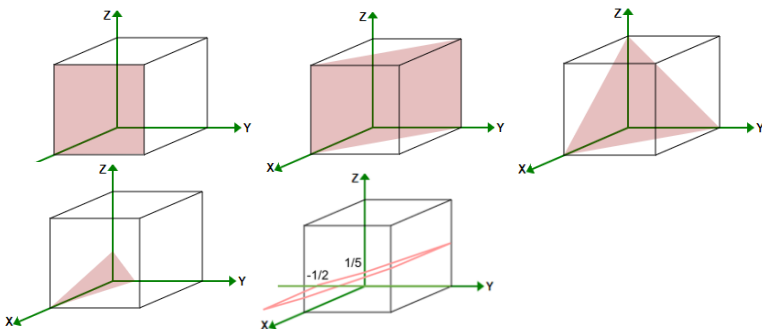
2. Relativní atomová hmotnost Fe je 55,845. α -Fe obsahuje 2 atomy v krychli o hraně 2.8665 Å, γ -Fe obsahuje 4 atomy v krychli o hraně 3.5753 Å. Jejich hustotu vypočítáme:

$$\rho = \frac{N \cdot A_r(\text{Fe}) \cdot m_u}{a^3} \quad (1)$$

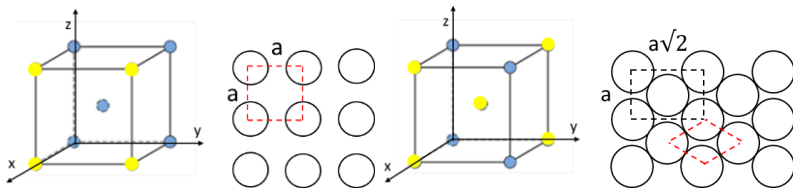
N je počet atomů v elementární buňce, m_u je atomová hmotnostní konstanta. Výsledné hustoty: $\rho(\alpha\text{-Fe}) = 7874 \text{ kg m}^{-3}$ a $\rho(\gamma\text{-Fe}) = 8116 \text{ kg m}^{-3}$

3. Rovina (100) protíná osu x v hodnotě 1 a je rovnoběžná s rovinou yz . (110) protíná osy x a y v hodnotě 1 a je rovnoběžná s osou z . (111) protíná každou z os v hodnotě 1. (143) protíná osu x v hodnotě 1, osu y v hodnotě 1/4 a osu z v hodnotě 1/3. ($\bar{0}25$) protíná osu y v hodnotě $-1/2$, osu z v hodnotě 1/5 a je rovnoběžná s osou x .

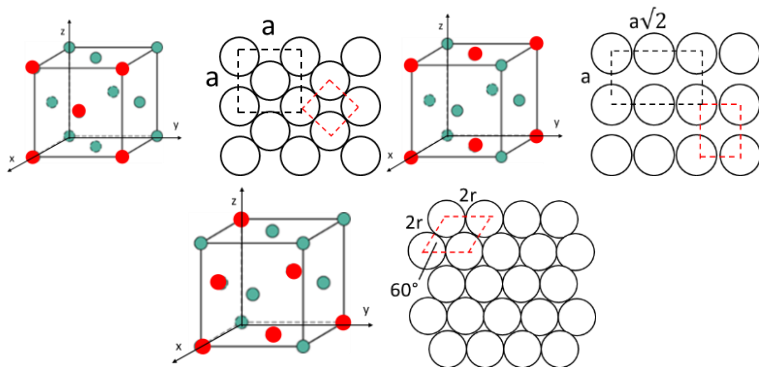
²⁰ Callister & Rethwisch 5e



Obrázek 2: Roviny (100), (110), (111), (143) a (025).²¹



Obrázek 3: Roviny (100) a (110) u prostorově centované struktury.



Obrázek 4: Roviny (100), (110) a (111) u plošně centované struktury.

4. a) Rovnoběžníky jsou červeně vyznačeny na obrázcích výše (Obrázek 3 a 4). V některých případech bude ale jednodušší použít k výpočtu rovnoběžníky vyznačené černě, které obsahují dva atomy.

²¹ https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller_indices/lattice_draw.php, poslední upraven

b) U prostorově centrované struktury se atomy dotýkají podél tělesové úhlopříčky, a tak: $4r = a\sqrt{3}$

(100): Plocha rovnoběžníku s jedním atomem je a^2 , což odpovídá $16/3r^2$, tedy $5,33r^2$.

(110): Plocha rovnoběžníku se dvěma atomy je $a^2\sqrt{2}$, což pro jeden atom odpovídá $8\sqrt{2}/3r^2$, tedy $3,77r^2$.

U plošně centrované struktury se atomy dotýkají podél stěnové úhlopříčky, a tak: $4r = a\sqrt{2}$

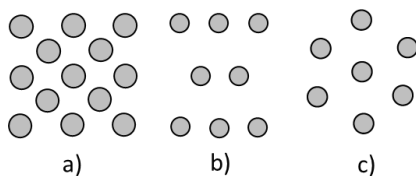
(100): Plocha rovnoběžníku se dvěma atomy je a^2 , což pro jeden atom odpovídá $4r^2$.

(110): Plocha rovnoběžníku se dvěma atomy je $a^2\sqrt{2}$, což pro jeden atom odpovídá $4\sqrt{2}r^2$, tedy $5,66r^2$.

(111): Plocha rovnoběžníku s jedním atomem je $(2r)^2\sin(60^\circ)$, což odpovídá $2\sqrt{3}r^2$, tedy $3,46r^2$.

c) Nej hustěji jsou atomy uspořádány v rovině (111) u plošně centrované struktury, tohle je nejtěsnější možné uspořádání a jeho vytvoření stojí nejméně energie, neboť atomy na povrchu z celkových 12 sousedních atomů ztratily jen 3 – tj. bylo potřeba zpřetrhat tři vazby na vytvoření $3,46r^2$ povrchu. Pokud to porovnáme například s rovinou (100) u téže struktury, atomy na povrchu z celkových 12 sousedních atomů ztratily 4 – tj. bylo potřeba zpřetrhat v průměru 3 vazby na vytvoření jen $3r^2$ povrchu.

5.

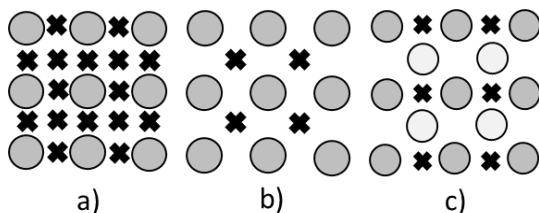


Obrázek 5: Difrakční obrazce struktur z podúlohy 5.

U první struktury si můžeme všimnout, že je ekvivalentní struktuře z obrázku 3, jen je otočená o 45° . Její difrakční obrazec bude tedy sestávat z bodů na čtvercové mřížce otočené o 45° . Difrakční obrazce pootočené o 45° oproti a) jsem uznávala jako ekvivalentní. Druhá struktura je velmi podobná té první, jen má delší horizontální vzdálenost mezi atomy. Její difrakční obrazec tedy musí mít kratší horizontální vzdálenost mezi difrakčními body. Třetí struktura

obsahuje body na kosočtvercové mřížce (je to (111) povrch u plošně centrované struktury), kdy mezi vektory \underline{a} a \underline{b} je úhel 120° , pokud si \underline{a} a \underline{b} zvolíme tak, aby začínaly v atomu uprostřed a končily na atomech vpravo nahoře a vpravo dole. Podle podmínky kolmosti vektorů - \underline{a}^* je kolmý k vektoru \underline{b} , vektor \underline{b}^* je kolmý k vektoru \underline{a} - bude mezi vektory v difrakčním obrazci 60° . Celý vypadá pootočený o 90° proti původnímu obrazci. Jiné volby vektorů se při řešení samozřejmě daly použít také.

6.



Obrázek 6: Difrakční obrazce struktur z podúlohy 6. Šedá kolečka odpovídají difrakčním bodům povrchu a adsorbátu dohromady, světle šedá kolečka jen difrakčním bodům povrchu a černé křížky jen difrakčním bodům adsorbátu.

U první struktury je vzdálenost mezi částicemi adsorbátu dvojnásobná než u atomů na povrchu, v difrakčním obrazci budou tedy difrakční body adsorbátu od sebe jen polovinu vzdálenosti difrakčních bodů povrchu – tj. mezi každými dvěma šedými kolečky bude jeden černý křížek. U druhé struktury jsou částice adsorbátu rozmístěné na čtvercové mřížce, která je oproti mřížce atomů $\sqrt{2}$ -krát větší a pootočená o 45° . Difrakční obrazec adsorbátu bude tedy na čtvercové mřížce $\sqrt{2}$ -krát menší a také pootočený o 45° – tj. uprostřed mezi každými čtyřmi šedými kolečky bude jeden černý křížek. Struktury celé pootočené o 45° jsem neodlišovala od těch nepootočených. Třetí struktura obsahuje uspořádání atomů ekvivalentní s 5a), adsorbát je ve vertikálním směru od sebe stejně vzdálený jako atomy, v horizontálním směru je ale jen na každém druhém atomu. V difrakčním obrazci se proto budou ve vertikálním směru všechny difrakční body adsorbátu překrývat s body povrchu, v horizontálním směru bude vzdálenost difrakčních bodů adsorbátu poloviční oproti povrchu (černý křížek mezi každými dvěma šedými kolečky). Difrakční body způsobené pouze atomy povrchu jsou vyznačeny světle šedou.

7. Vytvořením grafu $\frac{p}{V(p_0-p)}$ vs $\frac{p}{p_0}$ získáme přímku, její směrnice je $\frac{c-1}{V_1c}$ a protíná osu y v bodě $\frac{1}{V_1c}$. Z nich můžeme vypočítat hodnoty těchto dvou konstant, c je 100 a V_1 je 500 mm^3 . Ze stavové rovnice ideálního plynu $pV = NkT$ dostaneme po dosazení V_1 počet částic adsorbovaných na povrch ($p = 10^5 \text{ Pa}$, $T = 273,15 \text{ K}$) – $N = 1,33 \cdot 10^{19}$. Plocha adsorbentu je tak $S = \frac{N \cdot A}{m} = \frac{1,33 \cdot 10^{19} \cdot 16 \cdot 10^{-20}}{0,2} = 10,6 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$.
8. Uvedené předpoklady v praxi znamenají, že 1) desorpce produktu je ireverzibilní proces, 2) $\frac{\Delta[P(\text{ads})]}{\Delta t} \approx 0$ a 3) $K_3 = \frac{[A(\text{ads})]^2}{[A(\text{g})]}$. Vyjádříme tedy rychlost vzniku produktu v plynné fázi:

$$\frac{\Delta[P(\text{g})]}{\Delta t} \approx k_5[P(\text{ads})] \quad (2)$$

$$\frac{\Delta[P(\text{ads})]}{\Delta t} = -(k_{-4} + k_5)[P(\text{ads})] + k_4[A(\text{ads})][B(\text{g})] \approx 0 \quad (3)$$

$$\frac{\Delta[P(\text{g})]}{\Delta t} \approx k_5 \frac{k_4[A(\text{ads})][B(\text{g})]}{k_{-4} + k_5} \quad (4)$$

A pak dosadíme za $[A(\text{ads})]$ z výrazu pro K_3 ($K_n = k_n/k_{-n}$):

$$\frac{\Delta[P(\text{g})]}{\Delta t} \approx k_5 \frac{k_4 \sqrt{k_3[A(\text{g})]/k_{-3}}[B(\text{g})]}{(k_{-4} + k_5)} \quad (5)$$

9. Příkladem mohou být všechny možné hydrogenace a redukce vodíkem (alkenů, alkynů, nitro \rightarrow amin), kde se využívá Pd/C, Pt, Raneyův nikl, Lindlarův katalyzátor.

Otázka 1 – 0,8 bodu, 2 – 0,5 bodu, 3 – 3,5 bodu, 4 – 2 body, 5 – 1,5 bodu, 6 – 1,8 bodu, 7 – 2,4 bodu, 8 – 2,5 bodu, 9 – 1 bod. Celkem 16 bodů.