



Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 19 (2020/2021)

Série 3

Chemie je všude: je ve vodě, je v půdě, je ve vzduchu a je i v nás samotných. Veškeré materiály jsou tvořeny chemickými látkami, chemické reakce nám každodenně pomáhají s tvarováním světa kolem nás a biochemické reakce nás vlastně utvářejí: katalytické reakce umožňují každodenní běh našich těl, neurotransmitery jsou nositeli našich emocí a naše DNA může dát vzniknout novým generacím. Avšak bez porozumění tajemným nebezpečnostvům s chemií spojeným jsme ji vydáni napospas, proto stojí za to ji poznat blíže a hlouběji, aby se stala naším dobrým sluhou a ne obávaným pánem.



Proč řešit KSICHT?

Milí řešitelé, KSICHT je zde již 19. rokem proto, aby Vám ukázal různá zákoutí chemie a přivedl Vás k jejich objevování. V průběhu školního roku k Vám doputují čtyři brožurky s úlohami z různých oblastí chemie, při jejichž řešení se naučíte mnoho nového a navíc si užijete kopu srandy, protože úkoly jsou mnohdy poněkud... neortodoxní. Prostřednictvím našeho seriálu se pak můžete seznámit s některými velkými chemickými tématy, která se Vám pokusíme předestřít stravitelně, zábavně a užitečně. V letošním ročníku to bude seriál s názvem *Krátký výlet do mikrosvěta*, který pro Vás připravili Vojtěch Laitl a Alan Liška. V neposlední řadě můžete v každé brožurce sledovat osudy skutečně neohroženého komiksového hrdiny, a sice Zajíčka chemika.

Za normální situace pořádá KSICHT v průběhu ročníku dva výlety, na kterých je možné se setkat s ostatními řešiteli, s organizátory a autory úloh. Celý ročník je zakončen týdenním soustředěním na Přírodovědecké fakultě UK, kde si mimo jiné vyzkoušíte práci v laboratořích a vyslechnete přednášky předních českých a světových vědců. Kapacitu tohoto soustředění máme pro 30 řešitelů, rozhodovat bude celkové umístění po 4. sérii.

Mimo to získávají úspěšní řešitelé i možnost prominutí přijímacích zkoušek na PřF UK a Univerzitě Palackého v Olomouci¹, a ti nejúspěšnější z Vás mohou dosáhnout na motivační stipendium na PřF UK nebo VŠCHT.

¹ KSICHT je brán jako předmětová soutěž v chemii podobná olympiádě.

**Termín pro odeslání řešení 3. série:
15. 3. 2021**

Elektronicky (PDF)	Papírově
http://ksicht.natur.cuni.cz/ odeslani-reseni	KSICHT Přírodovědecká fakulta UK Hlavova 2030 128 43, Praha 2

Jak řešit KSICHT?

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

V každé brožurce je pro Vás připraveno 5 úloh k vyřešení. Jsou mezi nimi zábavné hříčky i opravdové oříšky. Pokuste se poradit si s nimi, jak nejlépe umíte, ale pokud je nevyřešíte všechny, nic se nestane. Budeme rádi, když nám pošlete odpovědi byť jen na část úkolů, které úloha obsahuje. Dbejte však, aby Vaše odpovědi byly srozumitelné a aby bylo zřejmé (zejména u výpočtů), jak jste k řešení dospěli.

Každou úlohu vypracujte **samostatně** na list formátu A4, na němž bude uvedeno **Vaše jméno, název a číslo úlohy**. V případě, že posíláte úlohy přes webový formulář (námi preferovaný způsob odeslání), uložte každou úlohu do samostatného souboru PDF.² Pro kreslení chemických vzorců doporučujeme používat programy dostupné zdarma: MDL ISIS/Draw, ChemSketch (freeware s povinnou registrací) nebo Chemtool.

Vypracované řešení úlohy odešlete organizátorům nejpozději do data uvedeného na následující stránce elektronicky nebo papírově (rozhoduje čas na serveru KSICHTu či datum poštovního razítka).

Autoři poté Vaše řešení opraví, ohodnotí je a pošlou Vám je zpět společně s následující brožurkou a dalšími úlohami k řešení. Řešitelé, kteří získají alespoň 50 % bodů z celého ročníku, obdrží certifikát o úspěšném absolvování semináře.

Vaše umístění ve výsledkové listině je také kritériem pro účast na závěrečném soustředění, detaily k přihlašování uvedeme v brožurce čtvrté série.

V případě jakýchkoliv dotazů se na nás neváhejte obrátit na e-mail ksicht@natur.cuni.cz nebo v případě dotazu ohledně úlohy napište autorovi úlohy na jmeno.prijmeni@ksicht.natur.cuni.cz.

² Neposílejte naskenovaná řešení s výjimkou obrázků, text bývá špatně čitelný.

KSICHTí desatero řešení úloh

Vzhledem k tomu, že se opakovaně někteří řešitelé dopouští neodpustitelných či méně závažných prohřešků, kvůli kterým zbytečně přicházejí o body, vytvořili jsme pro Vás seznam zásad, kterých je dobré se držet.

1. Jen jeden KSICHT řešiti budeš.
2. Nebudeš si zoufat, že nevyřešíš všechno a správně.
3. Nebudeš se klanět Güghlu ni jiným vyhledávačům. Informaci svou si vždy ověříš.³
4. Nezkopíruješ W'k'p_ed_{ii} českou ni anglickou ni v jazyku jiném psanou.⁴
5. Pamatuj na den odeslání, že ti má být svatý. Čtyři týdny řešiti budeš, dne (před)posledního odesláno míti budeš.
6. Rukopis vlastnoruční nenaskenuješ, ale do obálky vložíš a poštou odešleš.
7. Neudáš výsledku bez výpočtu.
8. Neopíšeš nadbytek číslic z kalkulatoru svého.⁵
9. Nepožádáš o řešení bližního svého.
10. KSICHTí jméno důsledně šířiti budeš.

³ Smyslem korespondenčního semináře je také dát Vám příležitost naučit se vyhledávat, třídit a kriticky vyhodnocovat dostupné informace. Proto můžete k řešení používat jakékoli tištěné i elektronické zdroje, se kterými je ale třeba správně zacházet – více v další poznámce.

⁴ Odevzdání textu získaného pomocí Ctrl+C, Ctrl+V není řešením úlohy. Tím má být Vaše vlastní formulace odpovědi na otázky v úloze, kterou jste sestavili na základě informací dostupných klidně i na Wikipedii. Zejména u internetových zdrojů je třeba každý zdroj kriticky zhodnotit: zdaleka ne každá stránka, příspěvek na blogu či diskusním fóru obsahuje pravdivé informace.

⁵ Tzv. kalkulatorový syndrom: „Svět byl stvořen za 6,999999999942 dní.“ Toto není ani správná, ani přesná hodnota.

Úvodníček

Drazí řešitelé KSICHTu,

rádi se s Vámi setkáváme i v novém roce 2021 a alespoň na dálku Vám přejeme, aby jeho průběh byl pro nás všechny příznivější než v tom předchozím. Vzhledem k tomu, že venku nyní panuje psí počasí jak meteorologicky, tak i dle nařízení vlády, rádi bychom Vám zpřijemnilí několik následujících dní při řešení našich nových úloh. Při jejich tvorbě jsme se více či méně inspirovali běžnými činnostmi, které lze doma dělat, a zkusili se na ně podívat chemickým pohledem.

Máloco dodá příbytku takový pocit domova jako poctivý domácí zeleninový vývar. Při vaření příjemně zvlhčí a provoní suchý zimní vzduch a následně i zahřeje buď na talíři, nebo při přípravě sofistikovanějších jídel. I prosté vaření zeleniny je ale ve skutečnosti pořádná věda. Co všechno za ním stojí, se dozvíte v domácím vědeckém experimentu zařazeném do první úlohy. Oblíbenou domácí kratochvílí je také koukání z okna. Vzhledem k nedostatku slunečních paprsků bohužel nyní můžeme koukat leda tak do tmy. I na takovém zdánlivě nesmyslném pozorování „ničeho“ se dá udělat kariéra, pokud ho pojmete dostatečně vědecky. S tajemstvím chemie prázdnoty se proto seznámíte v úloze druhé.

Se zkracujícími se dny roste i jisté domácí uvelebení, během kterého se naše sportem vytrénované postavy postupně obalí ochrannými tukovými polštáři, které nám dodávají při sezení stabilitu a příjemně izolují vnější chlad. S přicházejícím jarem jsou někteří z nás vystaveni puzení tyto pracně vypěstované polštáře ještě pracněji shodit s pomocí procesu, kterému angličtináři říkají „Getting in Shape“. Děje se tak nejčastěji prostřednictvím běžných cviků, které však pracují výhradně na běžné, makroskopické úrovni. Jak ale získat svůj shape na úrovni molekulární Vám poradí pouze úloha třetí. Při každém důkladném cvičení, ať už fyzicky nebo fyziky, se časem dostaví jistá excitace. Začneme měnit barvu v obličejí, sálá z nás neviditelné záření, a když to přeženeme, občas i kdesi uvnitř něco přeskočí. Nejinak jsou na tom i molekuly. Věda, která se popisem tohoto jevu zabývá, se nazývá spektroskopie a blíže se s ní poznáte v úloze čtvrté.

Na úplný závěr jsme pak pro Vás na poslední chvíli přichystali téma vysoce aktuální, které doslova hýbe celým světem. Nemusíte se bát, že by tato úloha byla šitá horkou jehlou, ale jehel se přesto velmi týká, neboť jejím tématem jsou vakcíny proti Covidu. Věříme, že jejím prostřednictvím Vám pomůžeme trochu proniknout do tohoto nepřehledného tématu a že se Vám bude tato úloha líbit a nepošlete nás jít se s ní bodnout.

Mnoho příjemných chvil při řešení této série a mnoho psychické pohody na čas mezi tím Vám přeje

Honza Havlík

Zadání úloh 3. série 19. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Dietní

(7 bodů)

Autorka: Aneta Pospíšilová

Máme nový rok a s tím se tradičně pojí různá předsevzetí. Rok 2020 byl ve znamení stresu a omezení pohybu, a tak nejednomu z nás přibyl nějaký ten faldík. Jistě by nám prospělo odlehčit stravu a zařadit do jídelníčku více zeleniny. Jenže jestli se u Vás doma do teď jedlo jen maso, možná při vaření zeleniny narazíte na problémy. Může ztrácet barvu, rychle se převářet nebo zůstat příliš dlouho tvrdá. Čím to je a jak tomu zabránit? Odpovědi (jak jinak) nabízí chemie.



Vyzkoušejte si přípravu ibiškového indikátoru a vaření zeleniny v neutrálním, kyselém a zásaditém prostředí podle níže uvedeného postupu. Pozorujte změny a zodpovězte doplňující otázky.

Mimo soutěž: Uvařenou zeleninu určitě nevyhazujte! Připravte si z ní jednoduché zeleninové jídlo, třeba večeri. Zeleninu nakrájejte, dochuťte solí a pepřem, zakápněte trochou oleje a podávejte posypanou opraženými a osolenými oříšky nebo semínky. Dobrou chuť.

1. Pokus:

Na 2 porce budete potřebovat:

- 6 malých mrkví (měly by být zhruba stejně velké)
- 3 malé brambory (měly by být zhruba stejně velké)
- 30 lusků čerstvých zelených fazolek (v nouzi lze nahradit 12 ks růžičkové kapusty)
- 1 sáček ibiškového nebo levného červeného ovocného čaje (ve složení by měly být na prvních 2 místech ibišek a jablko)
- 12 ml (asi 1 velká lžice) 8% octa
- 6 g (asi 1 vrchovatá lžička) jedlé sody
- 3 hrnce
- 3 misky
- hrnek
- stopky
- vidličku, lžici, nůž, naběračku
- 3 číré bezbarvé sklenice

Postup:

- Mrkve a brambory oloupejte, z fazolek odřízněte konce. Brambory rozpulte. Do každého hrnce dejte 1,5 l vody a přiveďte k varu (máte-li málo hrnců nebo plotýnek, nedělejte pokusy vedle sebe, ale postupně). Do prvního hrnce přidejte jedlou sodu a označte ho štítkem nebo lihovou fixou jako „alkalický“. Do druhého nepřidávejte nic a označte ho „neutrální“. Do třetího přidejte ocet a označte ho jako „kyselý“. Vedle každého hrnce dejte stejně označenou misku a sklenici.
- Do každé sklenice odeberte asi 100ml vzorek příslušné vody z hrnce.
- Do každého hrnce dejte 1 bramboru, 2 mrkve a 10 fazolek. Začněte stopovat čas. V případě, že voda vře příliš prudce, trochu ztlumte var. Voda by měla po celou dobu pokusu mírně, ale zřetelně bublat.
- Každé dvě minuty píchněte vidličkou do každého druhu zeleniny v každém hrnci a sledujte, jak rychle měknou. Pokud si nejste jistí, ochutnávejte. Tu zeleninu, která je příjemně měkká, vyberte z vody a dejte na příslušnou misku. Čas nutný k uvaření zapište do tabulky 1.
- Po uvaření veškeré zeleniny zdokumentujte také konzistenci, chuť a barvu. Vyfoťte a zapište do tabulky 1. Fotku pošlete na mail aneta.pospisilova@ksicht.natur.cuni.cz. Do předmětu napište název úlohy a svoje jméno.
- Připravte ibiškový indikátor: Sáček čaje zalijte 100 ml horké vody a nechte 10 min louhovat. Do každé sklenice se vzorkem vody z hrnce přidejte lžící ibiškového indikátoru. Zamíchejte a výslednou barvu roztoku porovnejte se stupnicí (obr. 1). Zjištěné pH zapište do tabulky 1.



Obrázek 1: zbarvení roztoku po přidání ibiškového indikátoru v závislosti na pH

Tabulka 1. Výsledky pokusu

Podmínky	pH		Fazolky	Mrkev	Brambora
Alkalické		Čas			
		Barva a chuť			
Neutrální		Čas			
		Barva a chuť			
Kyselé		Čas			
		Barva a chuť			

- Při přidání jedlé sody do horké vody jste nejspíš pozorovali bubláni. Pokud zjistíte někde, kde je tvrdá voda, mohli jste si všimnout i vzniku malého množství sraženiny. Vysvětlete oba jevy a запиšte je chemickou rovnicí.
- Co obsahuje zelenina, kterou vaříme? Uveďte procentuální obsah základních živin (bílkoviny, tuky, sacharidy, vláknina) ve fazolkách, mrkvi a bramborách. Uveďte také zdroj dat.
- K mrkvi a fazolkám napište, jaké rostlinné barvivo je zodpovědné za jejich barvu. Nakreslete strukturní vzorce barviv a označte, která část molekuly je zodpovědná za absorpci světla.
- Čím to je, že zelenina varem měkne? Které živiny v zelenině mění strukturu a jaký na ně má vliv pH vody? Porovnejte s výsledky pokusu.
- Která zelenina v kterém hrnci změnila barvu a proč? Zapište, co se stalo s rostlinným barvivem.
- Jaké barvivo je přítomné v ibiškovém indikátoru a co se s ním děje v kyselém a alkalickém prostředí? Zapište rovnice reakcí.

Úloha č. 2: Nekonečná prázdnota

(9 bodů)

Autoři: Tatiana Nemirovich a Adam Jaroš



Young Ellie: Dad, do you think there's people on other planets?

Ted Arroway: I don't know, Sparks. But I guess I'd say if it is just us... seems like an awful waste of space.

(Film Kontakt z roku 1997)

Kdysi dávno byl vesmír synonymem pro nekonečnou prázdnotu. Věřilo se, že za hranicemi naší atmosféry není nic kromě hvězd oddělených obrovskými vzdálenostmi. Chemické procesy však ve vesmíru mají své místo – atomy a molekuly lze nalézt nejen ve hvězdách a planetách.

1. Který izotop jakého prvku je ve vesmíru nejrozšířenější a proč?

Atomy a molekuly tvoří například mlhoviny. V nejhustších oblastech takových mlhovin může jeden krychlový centimetr obsahovat i tisíc atomů nebo molekul. Dokonce i ty „prázdné“ oblasti vesmíru mohou obsahovat jednotky až desítky atomů nebo molekul, tentokrát však již v krychlovém metru.

2. Vypočítejte, kolik částic je v jednom metru krychlovém vzduchu na Zemi. Uvažujte standardní podmínky a složení vzduchu 21 % O₂ a 79 % N₂. Výsledek porovnejte s výše zmíněným počtem částic v mlhovinách.

V mezihvězdném prostoru probíhají unikátní chemické procesy. Atomy a molekuly absorbují všudypřítomné elektromagnetické záření, které převádí molekuly do excitovaných nebo ionizovaných stavů. Při nárazu na jiné takto vzbuzené molekuly dojde ke vzniku neočekávaných produktů. V laboratoři takové procesy téměř není možné reprodukovat. Příkladem takové reakce může být vznik molekuly isokyanovodíku. V roce 1970 byla v mezihvězdném prostoru detekována přítomnost molekuly se vzorcem HNC, která je tautomerní ke známému kyanovodíku HCN. V mezihvězdném prostoru HNC existuje ve formě zwitteriontu H-N⁽⁺⁾≡C⁽⁻⁾ a vzniká například během disociativní rekombinace složitějších iontů:



3. Vysvětlete, co je to tautomerie, a napište její tři (pozemské) příklady. Vysvětlete také, co je to zwitterion a jaké nejznámější sloučeniny tuto formu zaujímají.

V roce 2009 byla v mezihvězdném prostoru objevena nejjednodušší aminokyselina, glycin, stejně jako ethan, ze kterého se může glycin tvořit, a kyanomethanimin, prekurzor dusíkové báze adeninu. Ačkoliv mohou takové molekuly existovat i mimo planety, vznik života je mnohem náročnější a stále poněkud neprobádaný proces vyžadující velice specifické podmínky.

4. Jmenujte alespoň dvě současné teorie vzniku života (biogeneze) a stručně je vysvětlete.

O několik let později (v roce 2015) bylo objeveno 21 organických látek, včetně ethylalkoholu, během studie plynového ocasu komety C/2014 Q2, známé také jako kometa Lovejoy (<https://advances.sciencemag.org/content/1/9/e1500863>). Modrozelená záře komety je výsledkem fluorescence organických molekul a vody iniciované UV zářením Slunce. V plynovém ocasu komety byly nalezeny tyto látky: voda, jednoduché uhlovodíky, kyslík, sirovodík, sloučeniny obsahující dusík, ethylenglykol, kyselina mravenčí, acetaldehyd, ethanol a jednoduché cukry – glykolaldehyd (viz tabulka 1).

Tabulka 1. Relativní počet molekul (%) ve vztahu k počtu molekul vody, kterých podle měření vzniká v kometě $6 \cdot 10^{29}$ za jednu sekundu.

Relativní zastoupení ve vztahu k počtu molekul vody (%)					
Sloučeniny s kyslíkem		Sloučeniny s dusíkem		Sloučeniny se sírou	
CO	1,8	HCN	0,09	H ₂ S	0,5
HCOH	0,3	HNC	0,004	OCS	0,034
CH ₃ OH	2,4	HNCO	0,009	H ₂ CS	0,013
HCOOH	0,028	CH ₃ CN	0,015	CS	0,043
CH ₂ OHCH ₂ OH	0,07	HC ₃ N	0,002	SO	0,038
HCOOCH ₃	0,08	NH ₂ CHO	0,008	NS	0,006
CH ₃ CHO	0,047				
CH ₂ OHCHO	0,016				
C ₂ H ₅ OH	0,12				

5. Kolik 0,7l lahví vína (obsahujících 15 objemových procent ethanolu) by bylo možné vyrobit z molekul ethanolu, které vyprodukovala kometa Lovejoy za dobu přestávky ve škole (15 minut)?

Poznámka: Hodnotu hustoty ethanolu vyhledejte v tabulkách.

6. Vymyslete 5 organických reakcí, které se dají provést za použití molekul z této komety, napište jejich produkty a o jaký typ reakce jde. Předpokládejte, že máte k dispozici potřebné katalytické množství silné kyseliny a báze.

Teplota povrchu komety, na který dostatečně nezáří světlo hvězdy, je zhruba 73 K. V blízkosti hvězdy může teplota povrchu naopak dosahovat až 500 K.

7. Může být průběh těchto reakcí různý v perihéliu (nejbližším bodě) a aféliu (nejvzdálenějším bodě) její orbity? Napište, jak závisí průběh chemických reakcí na teplotě (zmiňte konkrétní zákon), a stručně prodiskutujte, jak se může lišit průběh reakcí v perihéliu a aféliu.

Kosmochemikům se poměrně často daří nalézt i to, co je i na Zemi stále považováno za exotické. Příkladem takových látek mohou být fullereny vznikající v planetárních mlhovinách.

Fullereny jsou molekuly tvořené atomy uhlíku uspořádanými do vrstvy z pěti a šestiúhelníků, uzavřené do tvaru koule. Nejstabilnější známý fullerén obsahuje 60 atomů uhlíku. Fullereny jsou novými perspektivními materiály pro techniku, mají supravodivé vlastnosti, jsou využívány jako mikrokomponenty v nanoinženýrství a pravděpodobně najdou své uplatnění i v lékařství.

8. Jak připravujeme fullereny v laboratorních podmínkách na Zemi?

Task No. 3: The First Molecular Shape of You

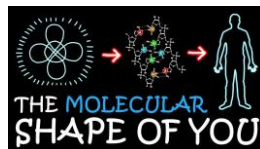
(12 points)

Authors: Štefan Malatinec and Ladislav Hovan

Dear Chemists,

We bring you a similar task as before in the season 2018/2019. If you are new here, we recommend checking it before you start solving this problem:

<http://bit.ly/ksicht-17-3>.



The task we have prepared this time is inspired by and follows the lyrics of the song **The Molecular Shape of You** by Tim Blais and A Capella Science: <https://youtu.be/f8FAJXPBdOg>. The following series of problems is supposed to make you think deeper about phenomena which we may take for granted. Some of the questions that may be beyond your knowledge are labelled as Bonus Questions, and you do not need to answer them to get full marks. However, if you answer them correctly, you will get a reward.

This task is written in English (the lyrics of the song would be challenging to translate), allowing you to practice and develop your language skills again. **However, we will accept your answers in English, Czech and Slovak languages.** We hope you will like the song and enjoy the task!

A dot isn't the best way to try to sum up how electrons come and go.

They are the states of a matter field that follows an equation that Dirac wrote.

The Schrödinger part of the whole equation will just lead.

In sub-c when it expands.

Now get that Coulomb and add it in with a proton.

And watch them start to dance.

As hydrogen, it's like

First and foremost, let's have a look in the Oxford English dictionary. We can find there a definition of an electron: "A subatomic particle which has a negative electric charge equal in magnitude to the positive charge of the proton is a constituent of all atoms and is the principal carrier of electric current in solids." As we learned, the electron is a particle, and most particles have a mass.

1. In which group of particles does an electron belong? Why do electrons follow the Pauli exclusion principle?
2. From the mass-to-charge ratio ($m/z = 5,6 \cdot 10^{-9} \text{ g C}^{-1}$), calculate the mass of the electron. In which spectrometry can one measure the mass-to-charge ratio?

Now, let's go back to deal with the song lyrics. Explaining the Dirac and Schrodinger equation is far from your knowledge (also mine), and we will therefore skip this part. If you are interested in quantum mechanics, I recommend an excellent application: Quantum by Štěpán Brychta.

3. According to the video, which function is the best way to *sum up how electrons come and go*?

Bonus 1: On which three most suitable coordinates is the ... (answer from 4. question) dependent for an atom?

4. Characterize electric charge, Coulomb law and electric field. (The answer should contain a brief explanation of given physical quantity and the corresponding equation.)
5. Two small spheres, one with a charge $Q_1 = 40 \text{ nC}$, the other $Q_2 = 80 \text{ nC}$, are placed next to each other at a distance of 1 cm. What are the forces acting on the balls when in the air ($\epsilon_r = 1$) and in the water ($\epsilon_r = 81$), $k = 9 \cdot 10^9 \text{ N m}^2 \text{ C}^{-2}$.

"Oh, proton I feel your tug

Central potential dip down pulling on me

But I'm not falling in deep

No that would break uncertainty"

6. Which equation/physical value describes the graph/drawing at 0:39? (It has nothing to do with the uncertainty principle.) Write down the equation as well as the graph with the axes labelled as appropriate.

Bonus 2: What is that equation coming from the drawing as well as in 0:39?

"Say oh

Electrons move too much

Slow down your pace and put that orbit on me

Come on now follow my lead

Come come on now follow my lead"

7. What is the yellow thing coming from the electron in 0:44? Briefly explain what energy conservation is.
8. Let us assume that the entire difference in energies of a freely moving electron and bound one gets converted into the yellow thing from the 9th question. What would be electron wavelength if travelling at 1 % of the speed of light gets

captured by a proton? The ground state energy for an electron bound in the hydrogen atom is $-\frac{1}{2}$ Hartree.

*Orbitals take the shape they do
As stable states of the quantum rules
And when a one approaches two
They combine and they're bonding
Thus, hydrogen as a rule
Is found in nature as H_2
Energy configuring a molecule
Diatomically bonding*

9. What is an orbital when we are talking about quantum mechanics? How many atomic orbitals do we recognize in a hydrogen atom by quantum numbers l and m_l (where $l = 0, 1, 2, 3$)? Draw the atomic orbital described by the quantum numbers $l = 2$ and $m_l = 0$.
10. What do the arrows represent in the 0:59? What would happen if the two arrows pointing in the same direction?

*Low high low high low high low high
Diatomically bonding ($\times 3$)
Energy configuring a molecule
When orbitals take the shape, they do*

11. What is a chemical bond? Why do molecules actually exist? *Hint: The answer is to be found at 1:10.*
12. At the same time, there is a graph. Draw the graph of how the energy of a system of two atoms varies with the internuclear distance. Apply the interval from zero to plus infinity for the x-axis. Which quantities do the two coordinates of the minimum correspond to?

For now, the task ends here. If you wonder if the rest of the lyrics will be a task in the next series, you are right. Obviously, we wish you luck in finding all the answers.

Úloha č. 4: Spektrální

(10 bodů)

Autor: Vojtěch Laitl

I řekl Bůh „Budiž světlo!“ A bylo světlo. Bůh viděl, že světlo je dobré, a oddělil Bůh světlo od tmy.

Genesis 1:3-4 (Počátek)



Spektroskopie je fyzikální obor, který se zabývá interakcí záření s hmotou (látkami). Povaha této interakce závisí na fyzikálních a chemických vlastnostech látky a vnějších podmínkách, typicky na teplotě nebo přítomnosti silových (elektrických a magnetických) polí. V této úloze se spolu s Vámi pokusíme podívat na základní popis jevů, které spektroskopie studuje, a na to, jak může tato disciplína obecně přispět k chemickému výzkumu.

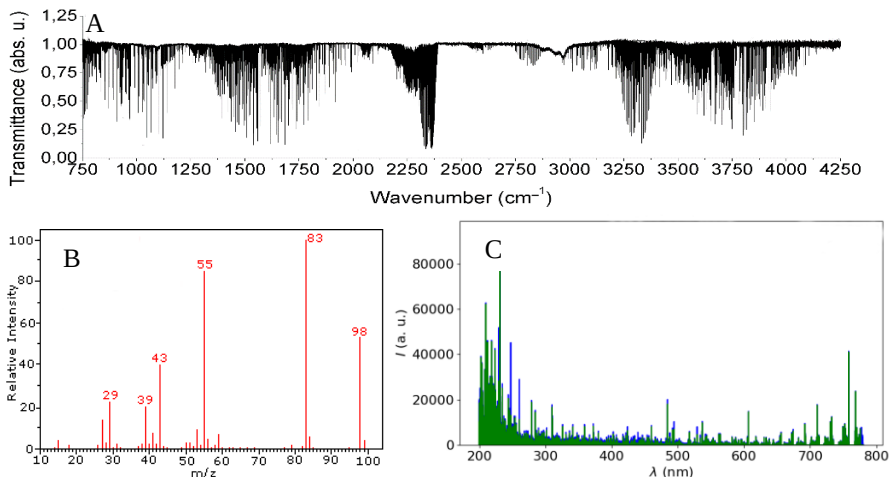
Začneme od začátku.

1. Známý úvodní citát hovoří o světle, které bude s naší oblastí zájmu úzce souviset. Jaké nepřesnosti bychom se však dopustili, pokud bychom řekli, že „spektroskopie zkoumá světlo“? Jaký jev je znázorněn na úvodním obrázku?

Atomová a molekulová spektra, jimiž se v chemii zabýváme, jsou obecně definována jako závislost počtu fotonů interagujících se zkoumanou látkou na jejich energii. Počet fotonů se typicky vyjadřuje jako absolutní nebo relativní intenzita záření nebo jejich jednoznačná transformace (vedoucí například k veličinám, jako je transmitance a absorbance). energii fotonů je možné (pomocí jednoznačného převodu) pohodlně vyjádřit jako frekvenci nebo jiné podobné charakteristiky elektromagnetického záření.

2. Měřením tří různých závislostí byla získána data, jež lze vyjádřit graficky na obrázcích 1A až 1C níže⁶. Z důvodů, jakým se budeme věnovat dále, je atomární spektrum čárové, spektra molekul bývají typicky pásové. Ve spektru atomů proto pozorujeme izolované linie, ve spektrech molekul se mnoho úzkých čar shlučuje za vzniku výrazně širších pásových oblastí. Určete, jaký z daných grafů odpovídá atomárnímu spektru, jaký spektru molekulárnímu, a jaký záznamem spektra není. Nezapomeňte své závěry stručně zdůvodnit.

⁶ Vzhledem k povaze úlohy není uveden zdroj.



Obrázek 1: Doprovodné obrázky k otázce 2

Jak lze vidět na správně přiřazených obrázcích, spektrum atomů a molekul typicky není spojité, ale obsahuje řadu diskrétních čar nebo izolovaných pásů. Důvodem této vlastnosti je kvantování pohybu a dovolených energetických stavů, které vstupuje do hry v kvantové mechanice. Atomy a molekuly mohou při svých pohybech zaujímat jen určité (kvantované) hladiny energie. Aby s nimi mohlo elektromagnetické záření interagovat, musí mít energii vždy přesně stejnou, jako je rozdíl energetických hladin v atomu nebo molekule. Mimo to je velmi důležité si uvědomit, v jakém fyzikálním ději mají měřená spektra původ.

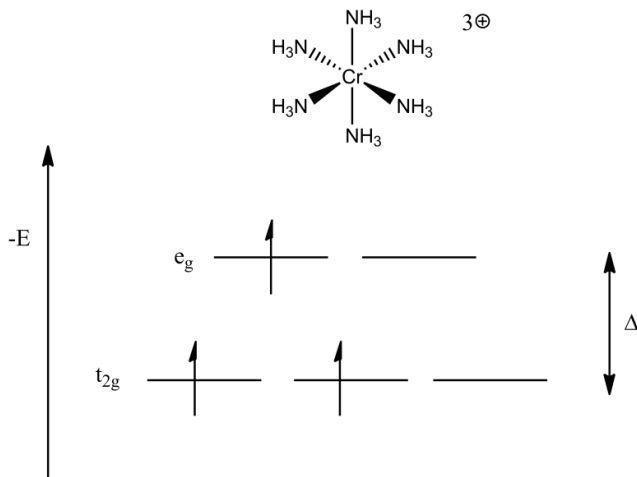
Dvěma základními procesy, které může spektroskopie pozorovat, je absorpce a emise. Při absorpci dojde k pohlcení fotonu o konkrétní energii, která vybudí v atomu či molekule přechod na vyšší energetický stav („urychlí“ rotační nebo vibrační pohyb, případně změni rozložení elektronů v částici za současného zvýšení energie). Emise je proces do jisté míry inverzní – částice při něm přecházejí do nižšího energetického stavu a vyzařují při tom fotony o frekvenci odpovídající rozdílu počáteční a koncové energetické hladiny.

- Podle výše uvedeného je možné dát si absorpci nebo emisi do souvislosti se změnou vnitřní energie systému. Pokuste se tuto veličinu zavést a vysvětlit, jakou má souvislost s energií jednotlivých částic.
- U molekulových systémů je vnitřní energie dána mimo jiné rotační a vibrační energií. Proč u izolovaných atomů (například vzácných plynů) tyto příspěvky nevystupují? Čím je pak dána jejich vnitřní energie?

Na obrázcích 1A až 1C dále vidíme, že čáry i pásy pozorované v reálných spektrech mají nenulovou šířku, a neodpovídají tedy pouze jedné izolované hodnotě energie, ale určitému intervalu energií, kde lze interakci pozorovat. Pojďme se pokusit zdůvodnit, proč tomu tak je.

Dobрым příkladem, na kterém můžeme vysvětlit důsledky některých základních vlastností reálných spekter, je různá úroveň popisu energetických hladin koordinačních částic. V následujících úlohách uvažujme fialový oktaedrický ion $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$. Barva tohoto komplexu souvisí s rozložením elektronů v celé částici, které je obecně složité na teoretický popis, může však být dobře studováno spektroskopicky.

Na obrázku níže je znázorněno štěpení d-orbitalů chromitého iontu v dané částici.



Obrázek 2: Vzorec komplexního iontu $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ a diagram štěpného stavu d-orbitalů $\text{Cr}(\text{III})$

- Pojmenujte studovanou koordinační částici podle systematického názvosloví a pokuste se zdůvodnit, proč v její elektronové struktuře dochází ke štěpení d-orbitalů. Nejste-li si jisti, doporučujeme nahlédnout do úlohy Zakomplexované čtverce (KSICHT, 17. ročník, 4. série), případně internetové encyklopedie Chemistry LibreTexts⁷.

⁷[https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Inorganic_Chemistry/Modules_and_Websites_\(Inorganic_Chemistry\)/Crystal_Field_Theory/Crystal_Field_Theory](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Inorganic_Chemistry/Modules_and_Websites_(Inorganic_Chemistry)/Crystal_Field_Theory/Crystal_Field_Theory)

6. Obsazení diagramu (obr. 2) odpovídá jistému excitovanému stavu koordinační částice. Jeho energii si označíme jako E_1 . Nakreslete, jak se změní rozložení elektronů v orbitalech, pokud částice v tomto stavu
- vyzáří foton o energii $h\nu = \Delta$ (konečný stav má energii E_2).
 - pohltí foton o energii $h\nu = \Delta$ (konečný stav má energii E_3).
 - Porovnejte pomocí znamének nerovnosti energie E_{1-3} . Odhadněte také vlnovou délku fotonu, která odpovídá energetickému rozdílu Δ .

Nápověda: Komplex se jeví fialový, protože jeho základní energetický stav absorbuje viditelné světlo o vlnové délce, jakou lidské oko vnímá jako jeho takzvanou komplementární barvu.

Pokud bychom se spolehli na toto přiblížení, pozorovali bychom ve spektru iontu $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ diskrétní linie s polohou přesně odpovídající uvedeným energiím. I ve spektrech atomů však dochází k tomu, že pozorovaným přechodům neodpovídá jedna hodnota, ale nenulový interval energií.

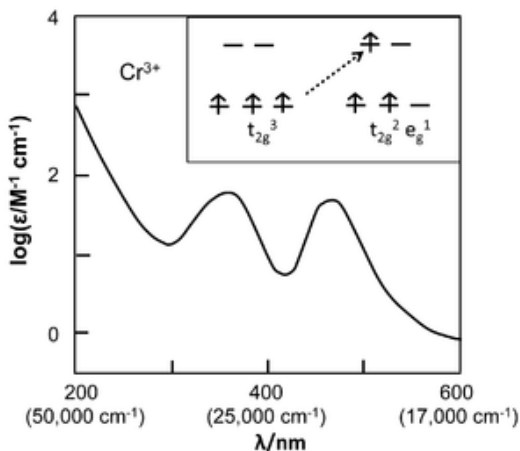
Základním důvodem nenulové šířky atomových spektrálních čar je kvantověmechanická relace neurčitosti mezi časem a energií. Čím kratší dobu daný stav částice v systému existuje („žije“), s tím menší přesností jsme schopni stanovit energie jeho přechodů.

7. Relace neurčitosti je v kvantové mechanice obecnější koncept. K jakým dvěma veličinám se vztahuje nejznámější z nich? Uveďte, po kom je pojmenována a co říká o vlastnostech částic.
8. Zamyslete se, jaké další jevy by mohly přispívat k rozšiřování spektrálních čar, a pokuste se stručně popsat alespoň jeden z nich. Jako drobnou nápovědu můžete využít například jméno rakouského fyzika Christiana Dopplera.

Ve skutečnosti neobsahuje spektrum iontu $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ diskrétní ani rozšířené atomární linie, ale takzvané pásy, které jsou dobře viditelné na příkladu absorpčního spektra. Výhodou barevných, tedy ve viditelném spektru absorbujících látek, je, že pořízení jejich spektra není složité. Vzorek zkoumané látky o vhodné upravené koncentraci (případně pH) ozáříme bílým světlem o známé intenzitě a pomocí citlivého detektoru určíme vlnové délky, na kterých došlo k poklesu intenzity vlivem absorpce molekul přítomných ve vzorku. Pozorujeme pak typické pásy, jaké si můžete prohlédnout na příkladu spektra níže.

Důvodem jejich vzniku je skutečnost, že energii iontu chromu vázaného v koordinační sloučenině ovlivňují vazebné pohyby celé částice, v tomto případě zejména vibrace aminových ligandů. Spektrum tak připomíná spíše molekulová spektra, kde pozorujeme buď samotné vibrační pohyby, nebo podobné

kombinované elektronové a vibrační přechody (takzvané vibronické přechody). K jejich šířce přispívá i to, že excitované stavy v roztoku žijí díky srážkám s molekulami rozpouštědla jen krátce, a neurčitost jejich energie je tedy velká.



Obrázek 3⁸: Absorpční spektrum iontu $[Cr(NH_3)_6]^{3+}$

Možné uvedené rozměry osy energie jsme diskutovali v první otázce, elektronové přechody zodpovědné za vznik absorpčního spektra v otázce 2. Zbývá si vysvětlit, o čem vypovídá na první pohled neobvyklá veličina ϵ , která se pro absorpční spektra v UV a viditelné oblasti často vynáší na osu intenzity.

O absorpčních vlastnostech chemických látek hovoří v běžně užívaném přiblížení takzvaný Bouguerův-Lambertův-Beerův zákon (v české literatuře běžněji Lambertův-Beerův zákon, v anglické *Beer-Lambert Law*). Představme si, že máme k dispozici vzorek zkoumané chemické látky o koncentraci c , který umístíme do kyvety o délce ℓ a necháme jím projít záření o vhodné vlnové délce λ . Poměr intenzity I záření, které po absorpci ve vzorku prošlo do detektoru, k počáteční intenzitě zdroje I_0 umožňuje definovat veličinu absorbance

$$A_\lambda = -\log\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\log \tau.$$

Poměr $\tau = \frac{I}{I_0}$ se někdy zvlášť označuje jako transmitance.

⁸https://en.wikibooks.org/wiki/Introduction_to_Inorganic_Chemistry/Coordination_Chemistry_and_Crystal_Field_Theory

Bouguerův-Lambertův-Beerův zákon pak pro hodnoty absorbance $A_\lambda \leq 2$ definuje její závislost na koncentraci sloučeniny vztahem

$$A_\lambda = \epsilon_\lambda c \ell.$$

Veličina ϵ , respektive ϵ_λ se nazývá molární absorpční koeficient. Pro danou chemickou látku a vlnovou délku jde o konstantu, která říká, jakou absorbanci látka vykazuje při jednotkové koncentraci a jednotkové optické dráze (délce kyvety). Pojďme si ilustrovat použití tohoto zákona v praxi.

9. Zůstaňme u komplexního iontu $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ a podívejme se na jeho druhý absorpční pás se středem kolem 475 nm. Odhadněte
 - a) molární absorpční koeficient ϵ_{475} tohoto iontu, pokud roztok $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$ o koncentraci $c = 0,2 \text{ mol dm}^{-3}$ *pohltil* v kyvetě o délce $\ell = 1 \text{ dm}$ přibližně 96,8 % procházejícího záření o vlnové délce 475 nm. Rozmyslete si, jak daný údaj souvisí s poměrem $\frac{I}{I_0}$ intenzity *prošlého* a dopadajícího záření, respektive s absorbancí. Chloridové ionty stanovení neovlivňují.
 - b) absorbanci roztoku o koncentraci $c = 0,05 \text{ mol dm}^{-3}$ měřeného ve stejné kyvetě. Pokud se Vám nepodařilo vyřešit předešlý příklad a potřebujete hodnotu molárního absorpčního koeficientu, uvažujte, že $\epsilon_{475} = 10 \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^{-2}$.

Číselné výsledky vycházející z konkrétních měření jsou jednoznačné a navzájem srovnatelné a přenosné. Je však také dobré mít přehled o tom, co nám říkají rámcově, případně provést srovnání. Pojďme se o jedno takové pokusit na závěr.

10. Bude barva daného komplexu v roztoku výrazná? Zdůvodněte. Nejste-li si jisti, doporučujeme prohlédnout si typické tabulkové hodnoty molárních absorpčních koeficientů pro manganistanové nebo (di)chromanové ionty známé zbarvením i intenzitou barvy.

Pokud při srovnání barevnosti komplexních částic a KMnO_4 narazíte na výrazný rozdíl, můžete se jej za drobné bodové zvýhodnění pokusit zdůvodnit. Vaše nápady zohledníme při tvorbě autorského řešení.

Úloha č. 5: Vakcíny proti Covidu**(15 bodů)**

Autoři: Karel Berka a Lenka Šimonová Bartoň



Dne 6. 1. 2021 byla Evropskou medicínskou agenturou (EMA) povolena k podmíněnému použití⁹ po vakcíně Pfizer-BioNTech Comirnaty¹⁰ již druhá vakcína (od firmy Moderna)¹¹ proti viru SARS-CoV-2, který způsobuje známou nemoc COVID-19.

Chceme Vám v KSICHTu psát úlohy na žhavá témata, proto se podíváme na fungování těchto moderních vakcín – z čeho se skládají a jakým mechanismem působí. Obě vakcíny obsahují několik složek (viz Tabulka 1), které zaručují, že je podána (injekcí do svalu) ve formě fyziologického roztoku liposomů obsahujících mRNA pro tzv. spike (S) protein SARS-CoV-2.

1. Roztřídte látky v Tabulce 1 do následujících kategorií podle funkce – aktivní látka, lipidový obal, pufr, regulace iontové síly, kryoprotektant.

Tabulka 1: Složení vakcín

Pfizer-BioNTech Comirnaty	Moderna COVID-19 Vaccine
mRNA	mRNA
ALC-0315	Lipid SM-102
ALC-0159	PEG2000 DMG
kolfosceryl-stearát	kolfosceryl-stearát
cholesterol	cholesterol
chlorid draselný	Tris-HCl
dihydrogenfosforečnan draselný	tris(hydroxymethyl)aminomethan
chlorid sodný	kyselina octová
dihydrát hydrogenfosforečnanu sodného	trihydrát octanu sodného
sacharosa	sacharosa
voda pro injekci	voda pro injekci

⁹ <https://www.ema.europa.eu/en/human-regulatory/overview/public-health-threats/coronavirus-disease-covid-19/treatments-vaccines-covid-19#authorised-medicines-section>

¹⁰ https://www.ema.europa.eu/documents/product-information/comirnaty-epar-product-information_cs.pdf

¹¹ https://www.ema.europa.eu/documents/product-information/covid-19-vaccine-moderna-product-information_en.pdf

2. Jak vidno z předchozí otázky, vakcíny obsahují pufrы. Jaká je jejich funkce? Jaké fyzikální veličiny se týkají a jakých hodnot tato veličina dle složení zřejmě nabývá?

3. Jakou funkci má ve vakcíně lipidový obal?

V obou vakcínách jsou látky obsahující PEG – polyethylenglykol:

4. Jaké má PEG ve vakcíně použití? Nakreslete jeho strukturní vzorec.

5. Co znamená číslovka 2000 v PEG2000? Kolik jednotek ethylenglykolu zhruba představuje?

Princip mechanismu působení je u obou vakcín podobný (viz obrázek 1).

A. Základem je mediátorová RNA (mRNA) kódující SARS-CoV-2 spike (S) protein/antigen. Několik nukleotidů v mRNA bylo nahrazeno modifikovanými nukleotidy Ψ .

B. mRNA je zabalena do lipidových nanočástic (liposomů).

C. Po aplikaci do svalu liposomy obsahující mRNA absorbují buňky v místě vpichu i buňky v nejbližší lymfatické uzlině.

D. Přechodná exprese S antigenu viru SARS-CoV-2 v endoplazmatickém retikulu hostitelské buňky.

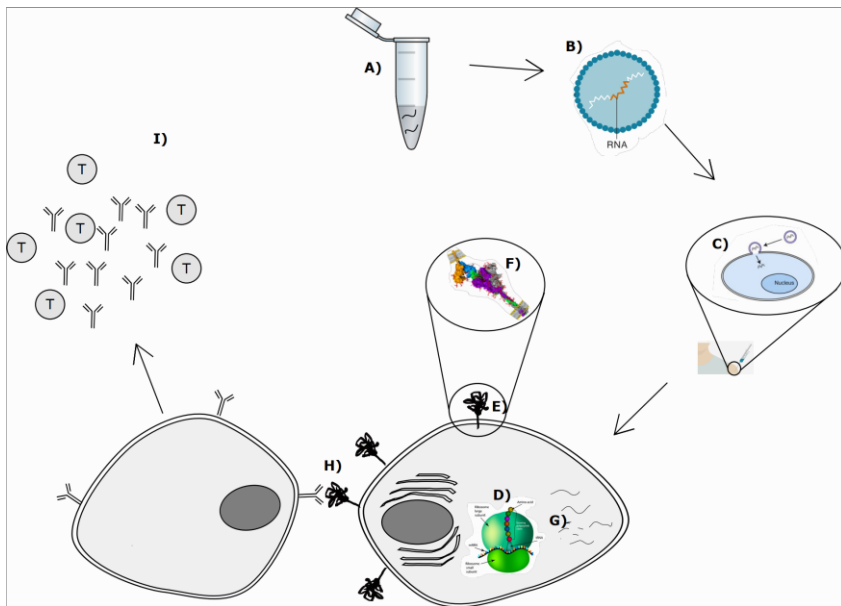
E. Export S proteinu/antigenu na membránu hostitelské buňky.

F. Úpravou sekvence je struktura S proteinu uzamčena v tzv. prefuzní konformaci, tj. takové konformaci, kterou má u viru SARS-CoV-2 S protein/antigen při interakci s lidským ACE2 receptorem.

G. mRNA v cytosolu hostitelských buněk postupně degraduje a mizí.

H. Rozpoznání virálního S antigenu na povrchu hostitelských buněk imunitními buňkami. Hostitelské buňky následně projdou apoptózou.

I. Tvorba specifických protilátek B-lymfocyty. Tvorba tzv. buněčné imunity v podobě paměťových T-lymfocytů.



Obrázek 1: Schéma fungování mRNA vakcíny

Jak na hostitelské buňce, tak na lipidové obálce virové částice SARS-CoV-2 je S protein vystaven na membráně. Na viru se maskuje v uzavřené konformaci, kdy povrch S proteinu vystavuje glykosylační obálku, která ho chrání před okolím a jen občas se otevře do otevřené prefusion konformace, v které se následně naváže na lidský ACE2 receptor. V případě vakcíny chránění není potřeba – gen pro S protein se upravuje tak, aby se prefusion konformace zafixovala.

6. Proč vakcíny využívají právě S protein SARS-CoV-2? Proč je označován jako antigen?
7. Ve vakcíně Pfizer se vyskytuje modifikovaný nukleotid s označením Ψ , což je 1-methyl-3'-pseudouridylyl. Místo kterého původního nukleotidu se v mRNA vakcíně používá a jaké se pro něj používá písmeno?
8. Úpravy mRNA S proteinu kromě modifikovaných nukleotidů zahrnují ještě přidání i) signální sekvence, ii) mutace několika aminokyselin na proliny a iii) polyadenylace na 3'-konci. Krátce vysvětlete efekty jednotlivých úprav.
9. Jak se nazývají enzymy degradující mRNA v buňkách i mimo ně?

Nelze opomenout, že kromě samotného mechanismu účinku se vyrojila velká spousta vzájemně si protiřečících informací o vakcínách.

10. Které z následujících tvrzení je pravda a které je nepravda a které zatím nevíme:

- a) Vakcína Pfizer obsahuje genetický kód.
- b) Vakcína Moderna neobsahuje genetický kód.
- c) Vakcína Pfizer je schopna změnit náš genetický kód.
- d) Po aplikaci vakcíny Pfizer již nemůžeme nakazit COVID-19 své okolí.
- e) Vakcína Moderna nás ochrání na doživotí.
- f) Vakcína Moderna je dnes (tj. 6. 2. 2021) povolena k běžnému použití v rámci EU.
- g) Vakcína Pfizer se nesmí podle očkovacího plánu (k 6. 2. 2021) aplikovat mladším 16 let.
- h) Prodělání nemoci COVID-19 v minulosti je kontraindikací podání vakcíny Pfizer.

11. Uveďte jednu pravdivou a jednu nepravdivou informaci o kterékoliv z vakcín. Ty nejnápaditější oceníme bonusovým bodem.

Řešení úloh 2. série 19. ročníku KSICHTu**Úloha č. 1: Cesta za výpočty tam, a zase zpátky****(8 bodů)**

Autorka: Karolína Fárníková

1. Silmarillion

2. a) Pro výpočet hmotnostních zlomků je potřeba si spočítat hmotnost zkoumané látky, což je v našem případě Bilbo, a hmotnost systému. Před večeří je situace následující: Bilbo váží 0,75 trp, jeden trpaslík 1 trp a Gandalf 1,4 trp. Tyto hodnoty dosadíme do vzorce pro výpočet hmotnostního zlomku a vyjde nám, že hmotnostní zlomek Bilba v družině je 4,95 %.

$$w_0 = \frac{m(\text{Bilbo})}{m(\text{sys.})} \cdot 100 \% = \frac{0,75}{0,75 + 13 + 1,4} \cdot 100 \% = 4,95 \%$$

Po večeří se situace mění. Bilbo zhubl o 0,0375 trp, každý trpaslík přibral 0,075 trp a Gandalf vážil 1,414 trp. Tyto nové hmotnosti se dosadí do stejného vzorečku jako předtím a vyjde, že po večeří je hmotnostní zlomek Bilba v družině 4,43 %.

$$w_0 = \frac{m(\text{Bilbo})}{m(\text{sys.})} \cdot 100 \% = \frac{0,75 - 0,0375}{0,75 - 0,0375 + 13 + 13 \cdot 0,075 + 1,414} \cdot 100 \% = 4,43 \%$$

- b) Jelikož jde podle našich aproximací o systém ideálního plynu, budeme pro výpočty vycházet ze stavové rovnice ideálního plynu. Na začátku počítáme s tím, že v prostoru nory se nachází pouze Bilbo, který váží 0,75 trp, tlak je p_0 , teplota T_0 a objem V (1). Na konci přijde do místnosti 13 trpaslíků, každý o hmotnosti 1 trp, a čaroděj o hmotnosti 1,4 trp, teplota se zvýší o 1,7 % na $1,017 T_0$ a objem místnosti je konstantní (2).

$$pV = nRT = \frac{m}{M}RT$$

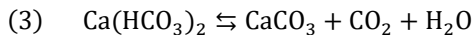
$$(1) \quad p_0 = \frac{0,75RT_0}{MV}$$

$$(2) \quad p = \frac{(0,75 + 13 + 1,4)R \cdot 1,017T_0}{MV}$$

Abychom zjistili, kolikrát se zvýšil tlak plynu, stačí podělit rovnicí 1 a 2. Vyjde, že se tlak v místnosti zvýšil 20,5krát.

$$\frac{p}{p_0} = \frac{\frac{15,15 \cdot R \cdot 1,017T_0}{MV}}{\frac{0,75 \cdot R \cdot T_0}{MV}} = \frac{15,15 \cdot 1,017}{0,75} = 20,5$$

3. Z rovnice reakce (3) zjistíme, že látkové množství rozpuštěného hydrogenuhličitanu vápenatého je stejné jako vysráženého uhličitanu vápenatého. Z dalších úprav a výpočtů zjistíme, že by ve vodě muselo být 1,48 tun hydrogenuhličitanu vápenatého, aby se vysrážel jeden zlobr.



$$m(\text{CaCO}_3) = 144 \text{ st (stone = kámen)} = 914,4 \text{ kg}$$

$$M(\text{CaCO}_3) = 100,09 \text{ g mol}^{-1}; M(\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2) = 162,1 \text{ g mol}^{-1}$$

$$n(\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2) = n(\text{CaCO}_3)$$

$$\frac{m(\text{CaCO}_3)}{M(\text{CaCO}_3)} = \frac{m(\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2)}{M(\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2)} \rightarrow m = \frac{M(\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2)m(\text{CaCO}_3)}{M(\text{CaCO}_3)} = 1,48 \text{ t}$$

Víme, že ve vodě je koncentrace hydrogenuhličitanu vápenatého $2,7 \text{ mmol dm}^{-3}$, což je $2,7 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$. Z té můžeme spočítat, kolik vody obsahuje potřebné množství uhličitanu vápenatého na zkamenění jednoho zlobra, a po vynásobení třemi získáme i teoretické množství vody obsahující potřebné množství uhličitanu vápenatého na zkamenění všech tří zlobrů. Jelikož ale Gandalfovi stačí jen miliontina, podělíme výsledek milionem a vyjde nám, že by Gandalf potřeboval $10,14 \text{ dm}^3$ vody.

$$c = \frac{n}{V} = \frac{m}{M(\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2)V} \rightarrow V_{1 \text{ zlobr}} = \frac{m}{M(\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2)c}$$

$$V = \frac{3m}{M(\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2)c} = \frac{3 \cdot 1,48 \cdot 10^6}{2,7 \cdot 10^{-3} \cdot 162,1 \cdot 10^6} = 10,14 \text{ dm}^3$$

4. Máme situaci, kdy se nám Bilbo přeměňuje na snědeného Bilba. Tyto dvě složky jsou v rovnováze a my z nich můžeme spočítat rovnovážnou konstantu. Z té získáme standardní Gibbsovu energii.



Tabulka 1: Stupeň konverze pro 278 K

Stupeň konverze	Bilbo	Snědený Bilbo
Začátek	c	0
Rovnováha	$(1-1/3) c$	$1/3 c$

Jeskyně:

$$K_1 = \frac{[\text{SB}]}{[\text{B}]} = \frac{\frac{1}{3}c}{\frac{2}{3}c} = 0,5 \rightarrow \Delta_r G_1^\circ = -RT \ln(K) = -R \cdot 278 \cdot \ln(0,5) = 1602 \text{ J mol}^{-1}$$

Mimo jeskyni:

$$K_2 = \frac{[SB]}{[B]} = \frac{\frac{1}{15}c}{\frac{14}{15}c} = \frac{1}{14} \rightarrow \Delta_r G_2^\circ = -RT \ln(K) = -R \cdot 298 \cdot \ln\left(\frac{1}{14}\right) = 6539 \text{ J mol}^{-1}$$

Pomocí rovnice (4) spočítáme reakční entalpii reakce. Ta nám vyšla záporná, tudíž proces je exotermický.

$$(4) \quad \Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ$$

$$1602 = \Delta_r H^\circ - 278 \cdot \Delta_r S^\circ$$

$$6539 = \Delta_r H^\circ - 298 \cdot \Delta_r S^\circ$$

$$1602 - 6539 = \Delta_r S^\circ [-278 - (-298)] \rightarrow \Delta_r S^\circ = \frac{-4937}{20} \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$\Delta_r H^\circ = 1602 + 278 \cdot \Delta_r S^\circ = 1602 + 278 \cdot \frac{-4937}{20} = -67,02 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Další možností, jak získáme entalpii děje, je pomocí van't Hoffovy rovnice v integrálním tvaru (5). Vyjádřením z ní můžeme získat požadovanou entalpii.

$$(5) \quad \ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{\Delta_r H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$\Delta_r H^\circ = \frac{\ln(K_2) - \ln(K_1)}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} = -67,02 \text{ kJ mol}^{-1}$$

5. Požadovaná teplota se dá spočítat podle tzv. Wienova posunovacího zákona (6). Za b se dosadila Wienova konstanta (2,898 mm K) a za λ libovolná vlnová délka v intervalu od 380 do 565 nm, což odpovídá barvám od fialové přes modrou až po zelenou. Níže je uvedeno řešení pro 380 nm a 565 nm.

$$(6) \quad \lambda_{\max} = \frac{b}{T} \rightarrow T = \frac{b}{\lambda_{\max}}$$

$$\lambda_z = 565 \text{ nm} \rightarrow T = \frac{2,897 \cdot 10^{-3}}{565 \cdot 10^{-9}} = 5127 \text{ K}$$

$$\lambda_f = 380 \text{ nm} \rightarrow T = \frac{2,897 \cdot 10^{-3}}{380 \cdot 10^{-9}} = 7624 \text{ K}$$

Z výpočtu vidíme, že těleso vyzařující světlo o kratší vlnové délce má vyšší teplotu.

6. Správnou rychlostní rovnici určíme z jednotek rychlostní konstanty. Pro 0. řád je jednotka $\text{mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, 1. řád s^{-1} a 2. řád $\text{mol}^{-1} \text{ dm}^3 \text{ s}^{-1}$. Z toho vyvodíme, že

jde o reakci 1. řádu. Dosazením do příslušné integrované rychlostní rovnice zjistíme, že 75 % jedu se rozpadne za 7,04 h.

$$c = c_0 e^{-kt} \rightarrow t = -\frac{\ln\left(\frac{c}{c_0}\right)}{k} = -\frac{\ln\left(\frac{(1-0,75)c_0}{c_0}\right)}{k} = -\frac{\ln(0,25)}{0,00328} = 423 \text{ min} = 7,04 \text{ h}$$

7. Model částice v krychlové potenciálové jámě nám popisuje následující rovnice (7), kde L je délka hrany, m_e hmotnost elektronu, h Planckova konstanta a n_i je hlavní kvantové číslo. V 3D prostoru pracujeme s 3 nezávislými kvantovými čísly. Abychom získali energii pátého excitovaného stavu, potřebujeme spočítat šestou nejnižší kombinaci $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. Od té odečteme energii základního stavu, která odpovídá nejnižší kombinaci kvantových čísel. Z tohoto rozdílu energií získáme energii fotonu, která je stejná jako součet energií všech 14 členů Thorinovy družiny.

$$(7) \quad E = \frac{h^2}{8L^2 m_e} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$E_0 \rightarrow n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1 \rightarrow n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 3$$

$$E_1 \rightarrow n_x = 1, n_y = 1, n_z = 2 \rightarrow n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 6$$

$$E_2 \rightarrow n_x = 1, n_y = 2, n_z = 2 \rightarrow n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 9$$

$$E_3 \rightarrow n_x = 1, n_y = 1, n_z = 3 \rightarrow n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 11$$

$$E_4 \rightarrow n_x = 2, n_y = 2, n_z = 2 \rightarrow n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 12$$

$$E_5 \rightarrow n_x = 1, n_y = 2, n_z = 3 \rightarrow n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 14$$

$$E_{0 \rightarrow 5} = E_5 - E_0 = \frac{h^2}{8L^2 m_e} [(n_{5,x}^2 + n_{5,y}^2 + n_{5,z}^2) - (n_{0,x}^2 + n_{0,y}^2 + n_{0,z}^2)]$$

$$E_{0 \rightarrow 5} = \frac{h^2}{8L^2 m_e} (14 - 3) = \frac{11h^2}{8L^2 m_e}$$

$$\begin{aligned} E_{0 \rightarrow 5} &= \frac{11h^2}{8L^2 m_e} = x \frac{hc}{\lambda} \rightarrow x = \frac{11h\lambda}{8L^2 m_e c} \\ &= \frac{11 \cdot 378 \cdot 10^{-9} \cdot 6,626 \cdot 10^{-34}}{8 \cdot (3 \cdot 10^{-10})^2 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8} = 14 \end{aligned}$$

8. Cena 6 lžiček je 12000 Kč a dá se spočítat pomocí trojčlenky.

11 lžiček.....22000 Kč

$$6 \text{ lžiček} \dots\dots\dots x \text{ Kč} \quad \rightarrow \quad x = \frac{6 \cdot 22000}{11} = 12000 \text{ Kč}$$

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

Úloha č. 2: Krycí jména po chemicku**(10 bodů)**

Autorka: Tereza Gistrová

První hra

1. Začínal modrý tým, jelikož musel uhodnout 9 pojmů. Vyhrál rovněž modrý tým, jelikož hlavní špión jako první dokázal najít asociace pro všechny své agenty (předpokládáme 100% přesnost při hádání).
2. Vyřešené herní pole + vysvětlení asociací:

Tabulka 1: Vyřešený herní plán první hry

NH_2NH_2	β -karoten	Čičibabin	trypsin	SDS
H_2O	akonitasa	lykopen	LiAlH_4	O_3
tryptofan	N_2	NaHCO_3	N_2O	thioaceton
adenylát-cyklasa	CrO_3	micela	NH_3	Bartoli
$\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$	methylparaben	Zn(Hg)	kinasa	CO_2

Tabulka 2: Vysvětlení asociací první hry

Modrý tým	Červený tým
<i>mýdlo</i> , 2 – dodecylsírán sodný (součást běžných mýdel), micela (princip fungování mýdla)	<i>autoprotolýza</i> , 2 – H_2O a NH_3 (samy podléhají autoprotolýze)
<i>indol</i> , 2 – Bartoli (Bartoliho syntéza indolů), tryptofan (aminokyselina odvozená od indolu)	<i>mrkev</i> , 2 – β -karoten (barvivo v mrkvi), $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ (sytě oranžová sloučenina)
<i>redukce</i> , 3 – LiAlH_4 (silné redukční činidlo), Zn(Hg) (Clemensova redukce), NH_2NH_2 (Wolffova-Kižněrova redukce)	<i>hasičák</i> , 2 – CO_2 (sněhový hasicí přístroj), NaHCO_3 (práškový hasicí přístroj)
<i>rajské</i> , 2 – N_2O (rajský plyn), lykopen (barvivo ve slupce rajčat)	<i>ATP</i> , 2 – kinasa (enzym katalyzující fosforylaci substrátu za pomoci ATP), adenylátcyklasa (enzym přeměňující ATP na cAMP)

Poznámka: při dostatečném odůvodnění byl pro nápovědu „mrkev“ uznáván i lykopen (karotenoid nacházející se v červené mrkvi) za 0,2 bodu; při výběru a zdůvodnění oxidačních činidel (redukujících se látek) pro nápovědu „redukce“ byla přiznána polovina bodů.

- Například spojením nápověd 1 a 3 do společné asociace „*Solvay*, 4“ – všechny čtyři uvedené sloučeniny (H_2O , NH_3 , CO_2 , NaHCO_3) se využívají jako vstupní chemikálie v Solvayově procesu výroby sody.
- Jde o thioaceton – v německém městě Freiburg se v roce 1889 rozhodli pokusit jej destilovat. Vzhledem k extrémnímu zápachu této sloučeniny (i ve velkém zředění) muselo být evakuováno celé město. Pěkně se k tomuto monstru vyjadřuje například tento článek, který si určitě stojí přečíst pro pobavení: https://blogs.sciencemag.org/pipeline/archives/2009/06/11/things_i_wont_work_with_thioacetone
- Nevybarvená pole tvoří po otočení pole vzhůru nohama tvar písmene J, což je písmeno, kterým se dříve označoval prvek jód (protonové číslo 53). Byly uznávány i pěkně odůvodněné asociace například o postupném zaplňování periodické tabulky (bílá nevybarvená místa představující neznámé prvky).

Druhá hra

6. a 7. Možné nápovědy jsou třeba následující:

Tabulka 3: Návrh asociací pro druhou hru

Modrý tým	Červený tým
<i>vitamin, 4</i> – riboflavin (B2), niacin (B3), pyridoxalfosfát (B6), kyselina askorbová (C)	<i>smrt, 3</i> – KCN (alfa a omega každé detektivky), kadaverin (součást mrtvolných jedů), juglon (inhibitor růstu konkurenčních rostlin ořešáku)
<i>báze, 3</i> – uracil (pyrimidinová báze RNA), DIPEA a Et ₃ N (bazické aminy používané v organické syntéze)	<i>Passerini, 3</i> – aldehyd, karboxylová kyselina a isokyanid (výchozí látky používané pro Passeriniho reakci)
<i>inert, 2</i> – N ₂ a Ar (plyny používané pro vytvoření inertní atmosféry pro reakci)	<i>chrpa, 2</i> – indigo, Fe ₄ [Fe(CN) ₆] ₃ (modré pigmenty)

Poznámka: Je zde důležité pořadí – kadaverin je totiž také bazický amin. Niacin je také karboxylová kyselina, takže musí být uhodnuta před nápovědou o Passeriniho reakci.

8. Ukázka návrhu řešení od Tomáše Hegera:

Inertní, 2 (dusík, argon, oba inertní plyny)

Bazální, 7 (odkazuje jednak na báze, kterými jsou uracil, Et₃N i DIPEA, jednak na bazální – základní metabolismus, který se odvíjí okolo minimálního příjmu energie. Během bazálního metabolismu se ale stále musí přijímat vitamíny, takže by se teoreticky daly zahrnout pod tento pojem. Navíc jsou vitamíny doslova bazální pro správný chod těla. Asociace s FADH₂ (jakožto koenzym se podílí na buněčném dýchání, které probíhá i za bazálního metabolismu) mi přijde nejvzdálenější.)

Otázka 1 – 3,4 bodu, *2* – 1 bod, *3* – 0,8 bodu, *4* – 0,6 bodu, *5* – 0,8 bodu, *6* – 1,8 bodu, *7* – 1,6 bodu, *8* – mimo bodování. Celkem 10 bodů.

Úloha č. 3: Ďáblův advokát**(10 bodů)**

Autor: Vlastimil Horálek

1. Maryša, bratři Mrštíkovi (případně Alois a Vilém Mrštíkovi).
2. As_2O_3 (případně As_4O_6), oxid arsenitý, otrušík, otruch, utrejch, prášek dědiců atp.
3. Smrtnou dávku arsenu (v případě akutní otravy) vypočítáme jako:

$$m(\text{smrtná dávka arsenu}) = m(\text{manžel}) \cdot \text{LD}_{50}(\text{arsen}) = 90 \cdot 20 \\ = 1\,800 \text{ mg}$$

Zesnulý manžel paní M. by do svého těla musel vpravit 1 800 mg arsenu (resp. sloučenin arsenu vzhledem ke zjednodušení v naší úloze), musí proto vypít toto množství kávy:

$$V(\text{káva}) = \frac{m(\text{smrtná dávka arsenu})}{c_m(\text{arsen ve vodě})} = \frac{1\,800}{100} = 18 \text{ l}$$

Zesnulý manžel by musel vypít 18 litrů kávy, aby došlo k akutní otravě sloučeninami arsenu, což je velmi nepravděpodobný scénář.

4. Aby se zesnulý manžel paní M. otrávil sloučeninami arsenu, musel by vypít 18 litrů kávy (vizte řešení předchozí úlohy).

Smrtnou dávku kofeinu (v případě akutní otravy) vypočítáme jako:

$$m(\text{smrtná dávka kofeinu}) = m(\text{manžel}) \cdot \text{LD}_{50}(\text{kofein}) = 90 \cdot 200 \\ = 18\,000 \text{ mg}$$

Zesnulý manžel paní M. by do svého těla musel vpravit 18 000 mg kofeinu, musí proto vypít toto množství kávy:

$$\text{počet šálků „turka“} = \frac{m(\text{smrtná dávka kofeinu})}{m(\text{kofein v šálku „turka“})} = \frac{18\,000}{250} = 72 \text{ šálků.}$$

To odpovídá tomuto objemu kávy:

$$V(\text{káva}) = (\text{počet šálků „turka“}) \cdot V(\text{„turek“}) = 72 \cdot 300 = 21\,600 \text{ ml} \\ = 21,6 \text{ l}$$

Zesnulý manžel by musel vypít 21,6 litrů kávy, aby došlo k akutní otravě kofeinem.

Smrtnou dávku vody (v případě akutní otravy) vypočítáme jako:

$$m(\text{smrtná dávka vody}) = m(\text{manžel}) \cdot \text{LD}_{50}(\text{voda}) = 90 \cdot 90 \\ = 8\,100 \text{ g} \approx 8\,100 \text{ ml} = 8,1 \text{ l}$$

Zesnulý manžel by musel vypít „jen“ 8,1 litrů kávy, aby došlo k akutní otravě vodou. Tato hodnota je ze všech tří vypočítaných hodnot nutných k akutní otravě danou látkou nejmenší. Pokud by se manžel paní M. pokoušel vypít množství kávy obsahující smrtnou dávku sloučenin arsenu, respektive kofeinu (v případě akutní otravy), zemřel by předtím na otravu vodou.

5. Jakýkoliv pravdivý příklad toxicity. Arsenité sloučeniny například blokují formování acetylkoenzymu A, často se vážou na cysteinové atomy síry, a inhibují tím činnost různých enzymů. Arseničné sloučeniny nahrazují fosfáty ve sloučeninách spjatých s glykolýzou, což narušuje tvorbu ATP, vážou se na thiolové skupiny cysteinu v enzymech a znemožňují jim správně fungovat. Mezi příznaky akutní otravy patří např. zvracení, průjem, svalové křeče, chronické otravě odpovídá šedě zbarvená pokožka, vysoký krevní tlak, bílé proužky na nehtech, zvýšení pigmentace pokožky aj.
6. Například dimerkaprol, dimerkaptojantarová kyselina (DMSA). Tyto látky obsahují thiolové skupiny, které se vážou na iont arsenu v jeho sloučeninách, čímž jej zachytí (chelatují) a zabrání jeho působení v těle.
7. Napoleon Bonaparte (případně jen Napoleon).
8. Například svinibrodská zeleň (pařížská zeleň, vídeňská zeleň, smaragdová zeleň), octan tris(arsenitan) měďnatý ($\text{Cu}_4(\text{CH}_3\text{COO})_2(\text{AsO}_2)_6$), je toxická látka. Scheeleova zeleň, hydrogenarsenitan měďnatý (CuHAsO_3), rovněž toxická.
9. Vysoký obsah sloučenin arsenu ve vlasech ukazuje na možnost chronické otravy, vzhledem k relativně pomalému růstu vlasů se musely sloučeniny arsenu ukládat po delší dobu. Ion arsenu vykazuje vysokou afinitu k síře, což je i důvod jeho nadměrného výskytu ve vlasech a v nehtech po dlouhodobější expozici. Ion arsenu v jeho sloučeninách se váže na atomy síry v cysteinu, který je hojně zastoupen v keratinu, bílkovině typické pro vlasy či nehty.
10. Mikroorganismy za den vyloučí 1,09 mg trimethylarsanu, přičemž pouze 10 % se uvolní do vzduchu, což je 0,109 mg, tedy $1,09 \cdot 10^{-4}$ g.

Objem trimethylarsanu zjistíme po dosazení do upravené stavové rovnice ideálního plynu:

$$V = \frac{mRT}{Mp} = \frac{1,09 \cdot 10^{-4} \cdot 8,314 \cdot 301,15}{120 \cdot 101325} \doteq 2,24 \cdot 10^{-8} \text{ m}^3$$

Rozměry ložnice odpovídají rozměrům 2,5 m a 4,5 m, strop se nachází ve výšce 2 m.

Objem vzduchu v místnosti vypočítáme jako $V = 2,5 \cdot 4,5 \cdot 2 = 22,5 \text{ m}^3$.

Podíl obou hodnot objemů vychází jako

$$\frac{2,24 \cdot 10^{-8}}{22,5} = 9,96 \cdot 10^{-10} = 0,996 \text{ ppbV}$$

Jelikož množství trimethylarsanu nepřesahuje 10 ppbV, lze vyloučit rizikovost pobytu v místnosti.

Smrtelná dávka trimethylarsanu odpovídá:

$$\begin{aligned} m(\text{smrtelná dávka trimethylarsanu}) &= m(\text{vojevůdce}) \cdot \text{LD}_{50}(\text{trimethylarsan}) \\ &= 79 \cdot 6\,000 = 474\,000 \text{ mg} = 474 \text{ g} \end{aligned}$$

Mikroorganismy denně vyprodukují 1,09 mg trimethylarsanu, do vzduchu se uvolní pouze 0,109 mg, tj. $1,09 \cdot 10^{-4} \text{ g}$. Aby ve vzduchu v místnosti vzrostlo množství trimethylarsanu na 474 g, musel by uplynout čas:

$$\begin{aligned} t &= \frac{m(\text{smrtelná dávka trimethylarsanu})}{m(\text{trimethylarsan vyloučený do vzduchu za den})} = \frac{474}{1,09 \cdot 10^{-4}} \\ &= 4\,348\,623 \text{ dní} = 11\,914 \text{ let} \end{aligned}$$

Doba 11 914 let je čas přesahující mnoho lidských životů, v našem případě nestačí na akumulaci smrtelné inhalační dávky trimethylarsanu ve vzduchu. Vojevůdce tedy nezemřel ani na akutní otravu trimethylarsanem vdechnutím.

11. Nejprve spočítáme molární koncentraci TMAO v původním vzorku moči. Poněvadž došlo ke zředění v poměru 1:4, je změřená molární koncentrace pětkrát menší než ta v původním vzorku.

Molární koncentrace v původním vzorku je:

$$c(\text{TMAO, původní}) = 5 \cdot c(\text{TMAO, zředěná})$$

$$\Rightarrow c(\text{TMAO, původní}) = 5 \cdot 3,2 \cdot 10^{-8} \text{ mol dm}^{-3} = 1,6 \cdot 10^{-7} \text{ mol dm}^{-3}$$

Hmotnostní koncentraci TMAO ve vzorku spočítáme ze vztahu pro výpočet molární koncentrace jako:

$$\begin{aligned} c_m(\text{TMAO}) &= c(\text{TMAO, původní}) \cdot M(\text{TMAO}) = 1,6 \cdot 10^{-7} \cdot 136 \\ &= 2,176 \cdot 10^{-5} \text{ g dm}^{-3} = 21,76 \text{ µg/dm}^3, \end{aligned}$$

což je méně než uvedená hranice 50 µg dm^{-3} .

Na základě výše uvedeného výpočtu můžeme usoudit, že vojevůdce nebyl otráven arsenem, sluha bude velmi pravděpodobně prohlášen za nevinného.

12. Např. Gutzeitovou zkouškou, Bettendorfovou zkouškou, Marshovou-Liebigovou zkouškou aj.

13. Marshova-Liebigova zkouška.

Princip Marshovy-Liebigovy zkoušky spočívá v tom, že vzorek s podezřením na obsah sloučenin arsenu je vložen do baňky, kde probíhá reakce mezi zinkem a kyselinou sírovou; vznikající nascentní (atomární) vodík má výrazné redukční schopnosti, přítomné sloučeniny arsenu redukuje na arsan, který uniká trubicí z baňky až do místa, kde je trubice zahřívána. Zvýšená teplota v tomto místě způsobí termický rozklad arsanu, který se projeví jako arsenové zrcátko.

Reakce kovu a kyseliny za vzniku nascentního vodíku:

$\text{Zn} + 2 \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{ZnSO}_4 + \text{H}_2$ (lze uznat i 2 H ve smyslu nascentního vodíku, uznatelná je i jiná kyselina než zde uvedená).

Reakce vodíku se sloučeninou arsenu, např. s As_2O_3 :

$\text{As}_2\text{O}_3 + 6 \text{H}_2 \rightarrow 2 \text{AsH}_3 + 3 \text{H}_2\text{O}$ (nebo odpovídající rovnice s nascentním vodíkem).

Rozpad arsanu a vznik arsenového zrcátka: $2 \text{AsH}_3 \rightarrow 2 \text{As} + 3 \text{H}_2$.

14. Antimon (případně Sb).

15. Arsenové zrcátko (As) lze rozpustit reakcí s NaClO a NaOH, antimon tímto způsobem nereaguje (antimonové zrcátko po přidání NaClO a NaOH zůstane).

Reakce rozpouštění arsenového zrcátka:

$2 \text{As} + 5 \text{NaClO} + 6 \text{NaOH} \rightarrow 2 \text{Na}_3\text{AsO}_4 + 5 \text{NaCl} + 3 \text{H}_2\text{O}$.

16. Krystalizace (arsenik krystalizuje, mouka ne), smíchání s vodou (arsenik se rozpustí, mouka vytvoří těstovitou hmotu), rozdílná hustota (stejné objemy jemně namletých látek, např. v odměrných nádobkách, budou vážit různě) atp.

17. 1 = deuterium (D)

2 = Křestní jména obou českých nositelů Nobelovy ceny začínají na písmeno J (Jaroslav Heyrovský, Jaroslav Seifert). (J)

3 = Při převodu světelné energie (foton) na energii chemickou se uplatňuje retinal, tj. aldehyd vitamínu A. Mrkev obsahuje vitamín A. (A)

4 = Ar, As, At, Au (potažmo Ag, Al) (A)

5 = Představa pekla bývá spojována s pachem síry, methionin i cystein obsahují síru. (S)

6 = Bobovité rostliny (Fabaceae) jsou známé svou symbiózou s hlízkovými bakteriemi (žijících v jejich kořenovém systému), které dovedou poutat vzdušný dusík, díky tomu jsou bobovité rostliny bohaté na látky obsahující **dusík** (bílkoviny). (N)

7 = Se srážením krve nesouvisejí pouze krevní destičky, nýbrž i **vitamín K**. (K)

8 = Štítná žláza produkuje hormony (např. thyroxin), které ve své struktuře obsahují **jod**. (I)

9 = **E**than, **e**then, **e**thyn. (E)

10 = 8,314 je číselná hodnota univerzální plynové konstanty **R** v jednotkách $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. (R)

11 = Molární hmotnost **M**. (M)

12 = Na obrázku je vyobrazen adenin, který se v DNA páruje s **thyminem**. (T)

13 = Ironman odkazuje železo (**Fe**), Německo germanium (**Ge**), fialovým výbojem září xenon (**Xe**), případně helium (**He**), značky těchto prvků obsahují písmeno **e**. (E)

Znění šifry je DJAASNKIERMTE.

Instrukce na zmuchlaném papírku naznačuje první a poslední pozici v šifře, tj. $A = D$, $Z = E$, obdobně $(A+1) = J$ (druhá pozice), $(Z-1) = T$ apod.

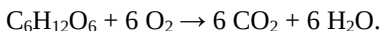
Po seřazení písmen dle této instrukce dostáváme vzkaz DEJTAMARSENİK, tedy DEJ TAM ARSENİK. Pekař bude pravděpodobně shledán vinným.

Otázka 1 – 0,2 bodu, 2 – 0,35 bodu, 3 – 0,6 bodu, 4 – 1 bod, 5 – 0,45 bodu, 6 – 0,4 bodu, 7 – 0,1 bodu, 8 – 0,8 bodu, 9 – 0,4 bodu, 10 – 0,85 bodu, 11 – 0,85 bodu, 12 – 0,2 bodu, 13 – 0,8 bodu, 14 – 0,1 bodu, 15 – 0,4 bodu, otázka 16 – 0,6 bodu, 17 – 1,9 bodu Celkem 10 bodů.

Úloha č. 4: Kulinářská**(11 bodů)**

Autor: Vojtěch Laitl

1. Bazální metabolismus je stav organismu, kdy jeho jediným energetickým výdejem je práce životně důležitých orgánů, nikoliv však trávicí soustavy. U běžného člověka nastává přibližně po půldenním půstu. Energetický příjem organismu v bazálním metabolismu je závislý na věku a tělesném stavu člověka, řádově se pohybuje kolem 4800 kJ (1000 kcal) za den. Není bez zajímavosti, že významnou částí bazálního metabolismu je činnost mozku. Ten je za běžných fyziologických podmínek schopen zpracovávat pouze glukosu, celkem ale až 120 g denně.
2. Základní složkou mouky je polysacharid škrob, v mléce najdeme takzvaný mléčný cukr laktosu. Čokoláda i ovocná pomazánka jsou slazené běžným cukrem sacharosou, v marmeládě navíc podle druhu a zpracování můžeme nalézt i ovocný cukr fruktosu a hroznový cukr glukosu.
3. Úplnou oxidaci, tedy spalení glukosy ve vzdušném kyslíku popisuje chemická rovnice



Teplo, které se za laboratorní teploty a tlaku 1 bar uvolní při této reakci, je rovno standardní reakční enthalpii $\Delta_r H^\circ$. Tu můžeme vypočítat z daných slučovacích enthalpií jejich vhodnou pomocí takzvaného Hessova zákona. Jeho vyjádření pro zkoumanou reakci vypadá následovně:

$$\Delta_r H^\circ = 6\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2) + 6\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}) - \Delta_f H^\circ(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6) - 6\Delta_f H^\circ(\text{O}_2)$$

Dosazení uvedených dat vede na výsledek $\Delta_r H^\circ = -4107,4 \text{ kJ mol}^{-1}$. Záporná změna reakční enthalpie znamená, že konečný stav systému (produkty) má nižší energii než stav počáteční (reaktanty). Při reakci tedy vzniká teplo, které se uvolňuje.

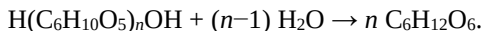
Zajímá-li nás teplo vztažené na kilogram hroznového cukru, využijeme jeho molární hmotnost a dostaneme, že

$$q = \frac{\Delta_r H^\circ}{M(\text{glukosa})} \cong -22,8 \text{ MJ kg}^{-1}.$$

Takto uvedená diskuse celého chemického procesu je velmi zjednodušená. Všechny chemické sloučeniny jsou oproti běžné realitě uvažovány ve svých nejstabilnějších termodynamických stavech, čemuž odpovídá například i to, že při reakci necháváme teoreticky vzniknout kapalnou vodu, nikoliv při hoření běžnou vodní páru. V živých soustavách je situace navíc složitější vlivem skutečnosti, že chemická energie typicky není využívána ve formě tepla, ale

jako takzvaná volná energie na syntézu makroergních molekul (typicky níže uvedeného ATP). I tento rámcový výsledek je však dostatečně vhodný pro navazující kvalitativní srovnání.

4. Škrob zjednodušeně запиšme jako $\text{H}(\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5)_n\text{OH}$, pro jeho hydrolytické štěpení pak bude platit sumární rovnice

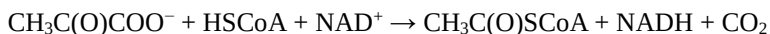


Molekula glukosy pak při procesu glykolýzy podléhá přeměně na pyruvát, anion kyseliny pyrohroznové, podle souhrnné rovnice



Alternativně lze dihydrogenfosforečnanový anion zapsat jen jako fosfát, P_i .

Pyruvát je pak přeměněn na molekulu oxidu uhličitého a takzvaného acetylkoenzymu A:



Ten je vstupním substrátem pro Krebsův cyklus, kde je dále oxidován při současném zisku chemické energie, jak ukazuje souhrnná rovnice

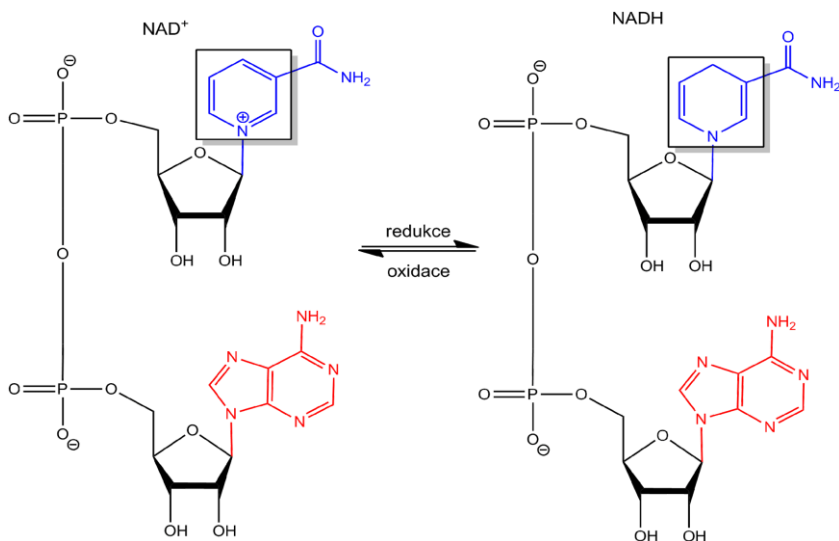


Chemickou podstatou dýchacího řetězce, který na Krebsův cyklus navazuje, je využití chemické energie takzvaných redukovaných kofaktorů (NADH , FADH_2 , viz dále) k redukci kyslíku na vodu a vodíkové protony, které jsou přenášeny membránou. Jejich (elektro)chemický gradient pak poskytuje energii k syntéze ATP, adenosintrifosfátu, základnímu zdroji energie pro další biochemické procesy v organismu.

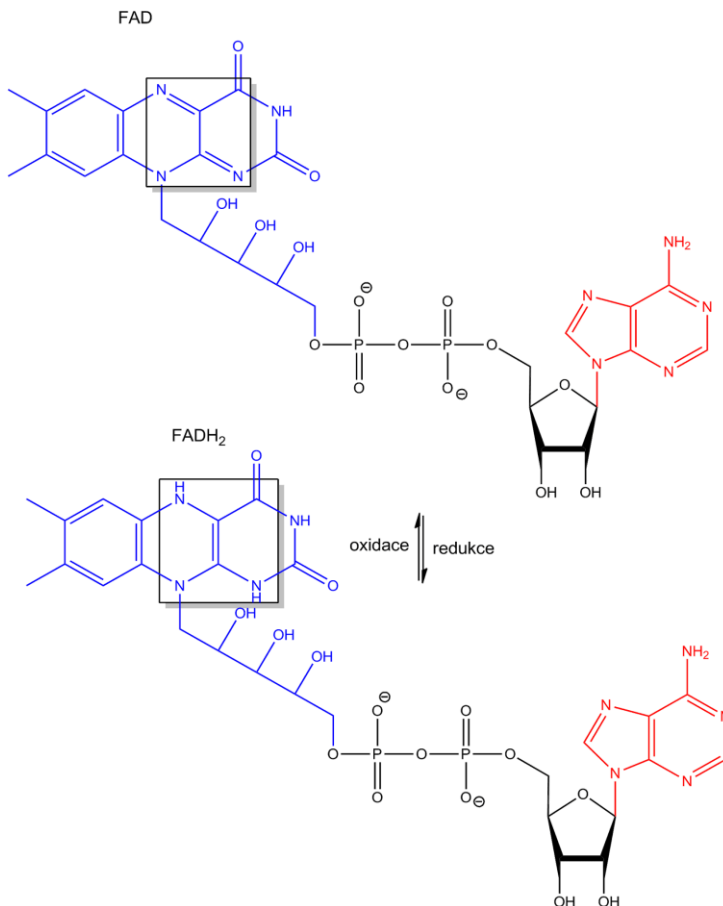
Štěpení škrobu a polysacharidů obecně probíhá volně v ústní dutině za účasti enzymu Ptyalinu a pokračuje ve střevech působením enzymu α -amylasy přítomného v pankreatické šťávě. Ostatní diskutované děje jsou typickými součástmi buněčného trávení, které probíhá uvnitř somatických buněk. Proces glykolýzy probíhá konkrétně v cytosolu, Krebsův cyklus v mitochondriální matrix. Enzymy dýchacího řetězce bychom našli na vnitřní mitochondriální membráně, pro jeho průběh je také důležitý přenos (mezi)produktů přes membránu do matrix.

5. Zkratky NAD^+ , respektive NADH , označují oxidovanou (vlevo) a redukovanou (vpravo) formu **nikotinamid****adenin**dinukleotidu.

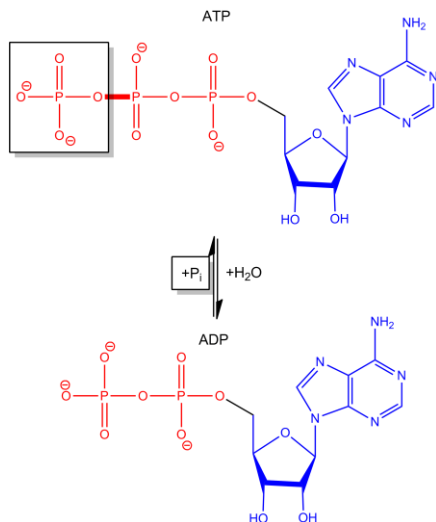
Nikotinamidadeninukleotid je takzvaný kofaktor, jehož úkolem je uchovávat chemickou energii. Redukce NAD^+ na NADH je endoergonická (volnou energii spotřebovávající), a probíhá tedy při přeměnách, které energii uvolňují. Oxidace NADH na NAD^+ je naopak exergonická (volnou energii uvolňující), a pomáhá tedy uskutečňovat energeticky náročné procesy, typicky syntézu ATP. Redoxní procesy ovlivňují strukturu aromatického jádra nikotinamidu, jak je ve schématu zvýrazněno rámečkem.



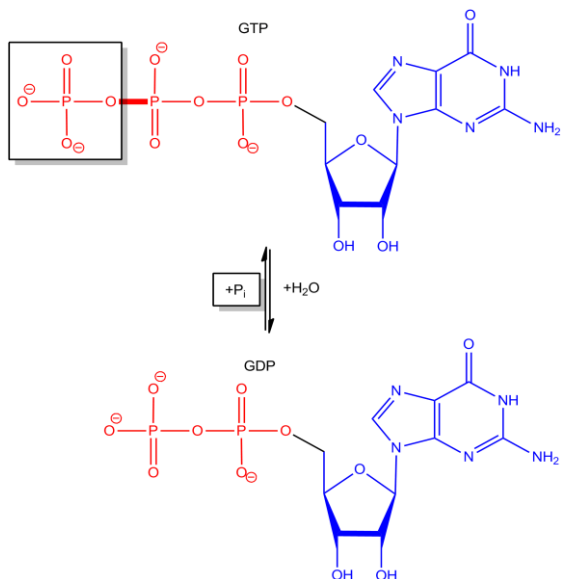
Podobnou funkci, a tedy i základní strukturní motivy, nalezneme také u kofaktoru FAD, respektive FADH_2 , oxidované a redukované formy **flavin**adeninukleotidu. Při endergonické redukci dochází k porušení konjugovaného systému dvojných vazeb zahrnujících atomy dusíku v heterocyklické struktuře riboflavinu, jak je na schématu zvýrazněno.



Další metabolicky velmi významnou sloučenin figurující v uvedených přeměnách jsou takzvané makroergní molekuly. Struktura nejméně známá z nich, zmíněná molekula ATP, **adenosintrifosfát**, je ukázána níže. Adenosin je příkladem nukleosidu, struktury obsahující nukleovou bázi vázanou na uhlík 1' cukerného zbytku ribosy. ATP je základním zdrojem energie v organismu, kterou uvolňuje rozkladem na ADP, **adenosindifosfát**, a anorganický fosfát (P_i , anion kyseliny tetraoxofosforečné, v rámečku). Stěžejní pro tento proces je štěpení **tučně** zvýrazněné makroergní vazby. Volná energie uvedené exergonické reakce se v závislosti na konkrétních podmínkách pohybuje mezi přibližně -30 kJ mol^{-1} a -35 kJ mol^{-1} . Pokud je energie získávána, například v průběhu glykolýzy, probíhá reakce opačným směrem a z ADP vzniká adenosintrifosfát, který je v organismu uložen.



Strukturním analogem ATP, se kterým jsme se setkali v Krebsově cyklu, je GTP, **guanosintrifosfát**, respektive jeho defosforylovaná forma GDP. Od ATP se liší strukturní jednotkou guaninu, druhé běžné purinové nukleové báze. Jeho role přenašeče energie je podobná jako v případě adenosintrifosfátu, nachází však uplatnění ve specifických reakcích, jakou je například syntéza proteinů.



6. Při dostatku potravy, například (ale nejen) v podobě sacharidů, se v organismu vytváří a ukládá v játrech zásobní polysacharid glykogen. Tento je v jistém smyslu isomerem rostlinného škrobu, od kterého se liší prostorovým upřádáním a větvením.

Pokud je sacharidů a potravy obecně naopak nedostatek, organismus vytváří a metabolizuje takzvané ketolátky – aceton, kyselinu acetoctovou a kyselinu β -hydroxymáselnou.

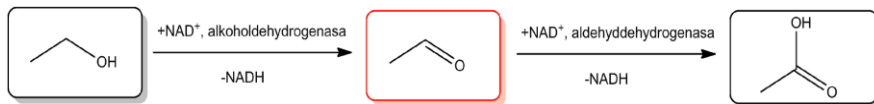
Tyto mohou sloužit jako nouzový zdroj rychlé energie, čehož využívá nízkosacharidová, takzvaná ketonová dieta. Její podstatou je rapidní omezení sacharidů v potravě, což s sebou provází odbourání glykogenu na monosacharidy a postupně až acetylkoenzym A. Poté, co jsou zpracovány i tyto, vzniká $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{SCoA}$ metabolismem v organismu uložených tuků a z něj postupně až ketolátky. Lidský organismus tak znatelně ztratí na váze.

Bohužel však současně citelně oslábne a může docházet k poruchám trávení, zejména složitějších látek (lipidů a bílkovin), ke kterému je částečně třeba energie získávaná metabolismem sacharidů.

7. Děkujeme všem řešitelům za hezkou a vtipnou fotodokumentaci. Nejvíce nás zaujaly příspěvky Nikoly Bartoňové, Elišky Prokopové, Šimona Sachera a Jakuba Sochora (níže seřazené podle abecedy):

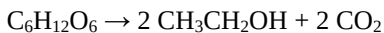


8. Správně doplněné schéma má například následující podobu



Nejtoxicičtější z uvedených sloučenin je acetaldehyd, nikoliv tedy ethanol samotný nebo konečný produkt jeho oxidace, kyselina octová. Tato dokonce v organismu dále reaguje za vzniku acetylkoenzymu A, na nějž jsme už narazili při popisu některých metabolických drah.

9. Vyčíslená chemická rovnice, která popisuje diskutovanou metabolickou přeměnu, má tvar



Řešení s využitím uvedených termochemických dat je podobné jako v otázce 3, konkrétně pro celkovou standardní reakční enthalpii píšeme, že

$$\Delta_{\text{r}}H^\circ = 2\Delta_{\text{f}}H^\circ(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}) + 2\Delta_{\text{f}}H^\circ(\text{CO}_2) - \Delta_{\text{f}}H^\circ(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6).$$

Vyčíslením dostaneme hodnotu $\Delta_{\text{r}}H^\circ = -1370,4 \text{ kJ mol}^{-1}$; pokud nás zajímá teplo vztažené na 1 kg hroznového cukru, analogicky převedeme jako

$$q = \frac{\Delta_{\text{r}}H^\circ}{M(\text{glukosa})} \cong -7,61 \text{ MJ kg}^{-1}$$

Porovnáním s výsledkem otázky 3 vidíme, že daný chemický proces produkuje řádově méně energie. Přestože je náš popis skutečně jen velmi rámcový, lze tento výsledek dobře extrapolovat. Anaerobní metabolismus glukosy a cukrů obecně je skutečně výrazně méně energeticky efektivní.

Otázka 1 – 0,2 bodu, 2 – 0,45 bodu, 3 – 1,45 bodu, 4 – 2 body, 5 – 2 body, 6 – 0,9 bodu, 7 – 2 body, 8 – 0,5 bodu, 9 – 1,5 bodu. Celkem 11 bodů.

Úloha č. 5: Termodynamická

(11 bodů)

Autor: Richard Veselý

1. Dějové veličiny: dráha, práce, teplo; Stavové veličiny: tlak, teplota, nadmořská výška, objem, entropie, entalpie, vnitřní energie
2. a) Experiment: Představte si, že převádíte plyn ze stavu jedna (p_1, T_1, V_1) do stavu dva (p_2, T_2, V_2). To lze provést mnoha způsoby. Plyn lze například nejdříve ochladit, vykonat na něm práci (zvýšit jeho objem působením vnější síly), a poté ho zahřát za konstantního objemu. Nebo naopak, plyn můžeme nejdříve zahřát, pak ho nechat expandovat a nakonec zchladit. Při každém z těchto způsobů změříme, že se na systému vykoná jiná práce a systém s okolím vymění jiné teplo. Když ale teplo a práci sečteme, dostaneme vždy stejné číslo. To můžeme shrnout tak, že existuje stavová veličina, jejíž změna je rovna součtu práce a tepla.
 - b) První termodynamický zákon nelze dokázat, protože nemáme nic, čím bychom mohli podpořit tvrzení, že bude platit vždycky. Na druhou stranu nikdy jsme nepozorovali, že by neplatil, a tak při předpovídání, co se stane, pokud provedeme to či ono, můžeme využít tohoto předpokladu, kterému věříme tak moc, že mu říkáme zákon.
 - c) Entalpie je definovaná tak, aby její změna byla rovna teplu, které systém vyměnil s okolím při dějích probíhajících za konstantního tlaku. (Moudří fyzici ji zavedli tak, aby její změna byla rovna teplu vyměněnému za konstantního tlaku.)
3. a) Pro spočítání vykonané práce w , přijatého tepla q , změny vnitřní energie ΔU , změny součinu tlaku a objemu $\Delta(pV)$ a změny entalpie ΔH použijeme následující postup:
 1. Spočítáme práci nebo teplo podle toho, co se ukáže být snazším pro daný děj.
 2. Spočítáme změnu vnitřní energie z definice izochorické tepelné kapacity:

$$\Delta U = c_{v,m} \cdot n \cdot \Delta T$$
 3. Dopočítáme vyměněné teplo nebo vykonanou práci z prvního termodynamického zákona: $q = \Delta U - w$
 4. Spočítáme změnu součinu tlaku a objemu z jeho definice:

$$\Delta(pV) = p_2 V_2 - p_1 V_1$$
 5. Spočítáme změnu entalpie z její definice: $\Delta H = \Delta U + \Delta(pV)$

Aplikujeme-li toto na jednotlivé děje, dostaneme: **D_I** ($S_i \rightarrow S_{iii}$)

1. **w**: Objem plynu se nemění, tudíž nemůže konat objemovou práci: $w = 0$.
2. **ΔU** : $\Delta U = c_{V,m} \cdot n \cdot \Delta T = c_{V,m} \cdot n \cdot (T_{\text{iii}} - T_{\text{i}}) = 12,47 \cdot 1 \cdot (674,7 - 273,1) = 5008 \text{ J}$
3. **q**: $q = \Delta U - w = 5008 - 0 = 5008 \text{ J}$
4. **$\Delta(pV)$** : $\Delta(pV) = p_{\text{iii}} \cdot V_{\text{iii}} - p_{\text{i}} \cdot V_{\text{i}} = (2,471 \cdot 22,71 - 1,000 \cdot 22,71) \cdot 10^2 = 3\,341 \text{ J}$
5. **ΔH** : $\Delta H = \Delta U + \Delta(pV) = 8\,349 \text{ J}$

D₂ ($S_{\text{iii}} \rightarrow S_{\text{ii}}$)

1. **q**: Děj je adiabatický, tedy z definice $q = 0$.
2. **ΔU** : $\Delta U = c_{V,m} \cdot n \cdot \Delta T = c_{V,m} \cdot n \cdot (T_{\text{ii}} - T_{\text{iii}}) = 12,47 \cdot 1 \cdot (513,6 - 674,7) = -2009 \text{ J}$
3. **w**: $w = \Delta U - q = -2009 - 0 = -2009 \text{ J}$
4. **$\Delta(pV)$** : $\Delta(pV) = p_{\text{ii}} \cdot V_{\text{ii}} - p_{\text{iii}} \cdot V_{\text{iii}} = (1,000 \cdot 42,71 - 2,471 \cdot 22,71) \cdot 10^2 = -1\,341 \text{ J}$
5. **ΔH** : $\Delta H = \Delta U + \Delta(pV) = -3\,350 \text{ J}$

D₃ ($S_{\text{i}} \rightarrow S_{\text{iv}}$)

1. **q**: Děj je adiabatický, tedy z definice $q = 0$.
2. **ΔU** : Teplota plynu se nezmění, pro ideální plyn tedy $\Delta U = 0$.
3. **w**: Plyn expanduje proti nulovému tlaku – sice mění objem, ale nepůsobí žádnou silou –, tedy $w = 0$ (totéž bychom obdrželi z prvního termodynamického zákona).
4. **$\Delta(pV)$** : $\Delta(pV) = p_{\text{iv}} \cdot V_{\text{iv}} - p_{\text{i}} \cdot V_{\text{i}} = (0,5317 \cdot 42,71 - 1,000 \cdot 22,71) \cdot 10^2 \text{ J} = 0$
5. **ΔH** : $\Delta H = \Delta U + \Delta(pV) = 0$

D₄ ($S_{\text{i}} \rightarrow S_{\text{iv}}$)

1. **w**: Práce vykonaná při reverzibilní izotermické expanzi se spočítá následovně¹²: $w = -nRT_{\text{i}} \ln\left(\frac{V_{\text{iv}}}{V_{\text{i}}}\right) = -1 \cdot R \cdot 273,1 \cdot \ln\left(\frac{42,71}{22,71}\right) = -1\,434 \text{ J}$

¹² K tomuto vzorečku se lze dostat z definice malé práce $dw = -pdV$ integrací.

2. ΔU : Teplota plynu se nezmění, tedy $\Delta U = 0$.
3. q : $q = \Delta U - w = 0 - (-1434) = 1\,434\text{ J}$
4. $\Delta(pV)$: $\Delta(pV) = p_{iv} \cdot V_{iv} - p_i \cdot V_i = (0,5317 \cdot 42,71 - 1,000 \cdot 22,71) \cdot 10^2\text{ J} = 0$
5. ΔH : $\Delta H = \Delta U + \Delta(pV) = 0$

D₅ ($S_{iv} \rightarrow S_{ii}$)

1. w : Objem plynu se nemění, tudíž nemůže konat práci: $w = 0$
2. ΔU : $\Delta U = c_{V,m} \cdot n \cdot \Delta T = c_{V,m} \cdot n \cdot (T_{ii} - T_{iv}) = 12,47 \cdot 1 \cdot (513,6 - 273,1) = 2999\text{ J}$
3. q : $q = \Delta U - w = 2999 - 0 = 2999\text{ J}$
4. $\Delta(pV)$: $\Delta(pV) = p_{ii} \cdot V_{ii} - p_{iv} \cdot V_{iv} = (1,000 \cdot 42,71 - 0,5317 \cdot 42,71) \cdot 10^2 = 2\,000\text{ J}$
5. ΔH : $\Delta H = \Delta U + \Delta(pV) = 4\,999\text{ J}$

D₆ ($S_i \rightarrow S_{ii}$)

1. w : Expanze probíhá proti konstantnímu tlaku, práce se tedy spočítá takto:
 $w = -p\Delta V = -p_i \cdot (V_{ii} - V_i) = -10^5 \cdot (42,71 - 22,71) \cdot 10^{-3} = -2000\text{ J}$
2. ΔU : $\Delta U = c_{V,m} \cdot n \cdot \Delta T = c_{V,m} \cdot n \cdot (T_{ii} - T_i) = 12,47 \cdot 1 \cdot (513,6 - 273,1) = 2\,999\text{ J}$
3. q : $q = \Delta U - w = 2\,999 - (-2000) = 4\,999\text{ J}$
4. $\Delta(pV)$: $\Delta(pV) = p_{ii} \cdot V_{ii} - p_i \cdot V_i = (1,000 \cdot 42,71 - 1,000 \cdot 22,71) \cdot 10^2 = 2\,000\text{ J}$
5. ΔH : $\Delta H = \Delta U + \Delta(pV) = 4\,999\text{ J}$

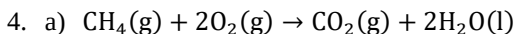
Děj	práce, w (J)	teplo, q (J)	$\Delta(pV)$ (J)	ΔU (J)	ΔH (J)
D_1	0	5008	3341	5008	8349
D_2	-2009	0	-1341	-2009	-3350
D_3	0	0	0	0	0
D_4	-1434	1434	0	0	0
D_5	0	2999	2000	2999	4999
D_6	-2000	4999	2000	2999	4999

- b) i. D_2, D_3
 ii. D_1, D_3, D_5
 iii. D_6
- c) Vykonaná práce a změna vnitřní energie jsou si rovny při adiabatických dějích – práce je konána „na úkor“ vnitřní energie. Nekona-li se žádná práce, je změna vnitřní energie rovna vyměněnému teplu. Z toho plyne, že při dějích, probíhajících za konstantního objemu (systém nekona objemovou práci), je vyměněné teplo rovné změně vnitřní energie. Změna entalpie je rovna teplu vyměněnému při izobarických dějích, což vyplývá z její definice.
- d) D_1 a D_2 ; D_3 a D_5 ; D_4 a D_5

e)

Děj	práce, w (J)	teplo, q (J)	$\Delta(pV)$ (J)	ΔU (J)	ΔH (J)
$D_1 + D_2$	-2009	5008	2000	2999	4999
$D_3 + D_5$	0	2999	2000	2999	4999
$D_4 + D_5$	-3434	4434	2000	2999	4999
D_6	-2000	5000	2000	2999	4999

- f) Stejná hodnota vyšla pro všechny stavové veličiny, tedy pro $\Delta(pV)$, ΔU a ΔH , neboť všechny tyto kombinace dějů převádí systém mezi stejnými dvěma stavy a změna stavových veličin nezávisí na cestě. Oproti tomu práce a tepla doprovázející tyto děje jsou různé, protože nezávisí jen na konečném a počátečním stavu, ale i na cestě.

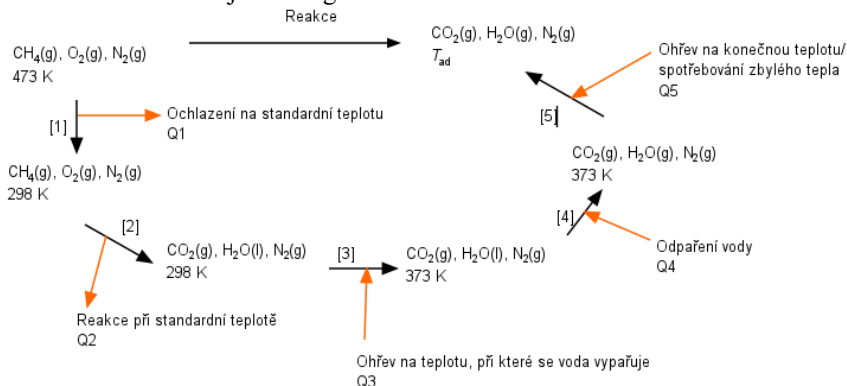


- b) Molární poměr kyslíku ku metanu v stechiometrické směsi vzduchu a metanu je $x_{\text{O}_2}:x_{\text{CH}_4} = 2:1$. Ve vzduchu je poměr dusíku ku kyslíku $x_{\text{N}_2}:x_{\text{O}_2} = 4:1$. Tedy ve stechiometrické směsi budou molární zlomky dusíku, kyslíku a metanu v následujícím poměru: $x_{\text{N}_2}:x_{\text{O}_2}:x_{\text{CH}_4} = 8:2:1$. Součet molárních zlomků musí být jedna, což dává následující molární zlomky: $x_{\text{N}_2} = 8/11$, $x_{\text{O}_2} = 2/11$, $x_{\text{CH}_4} = 1/11$.

V průběhu reakce se celkové látkové množství nezmění, a tedy $x_{\text{N}_2}:x_{\text{H}_2\text{O}}:x_{\text{CO}_2} = 8:2:1$.

- c) Adiabatickou teplotu plamene T_{ad} vypočteme tak, že teplo uvolněné zmíněnou reakcí použijeme na ohřev produktů této reakce a inertní složky. Bohužel nevíme, kolik tepla se uvolní v průběhu této reakce při teplotě 473 K, při které probíhá. Protože však reakce probíhá za konstantního tlaku, víme, že teplo při ní uvolněné je rovno změně entalpie. Entalpie je stavová veličina, a můžeme tak spočítat teplo uvolněné při reakci jako součet změn

entalpií doprovázející sérii dějů, které převedou systém z počátečního stavu (reaktanty při 473 K) do konečného stavu (produkty při teplotě T_{ad}). To lze ilustrovat následujícím diagramem:



Tento diagram zároveň navrhuje postup výpočtu rozebraný níže. V prvních dvou krocích se uvolní teplo, které se pak částečně použije na ohřev produktů na výparnou teplotu vody, odpaření vody a konečně na ohřátí produktů na finální teplotu T_{ad} .

- d) Při ochlazení molu reaktantů na teplotu, pro kterou známe reakční entalpii (která závisí na teplotě, a proto musíme reaktanty „převést“ na tuto teplotu), je změna entalpie rovna: $\Delta H_1 = c_{p,m_1} \cdot \Delta T_1$, kde c_{p,m_1} je molární tepelná kapacita reakční směsi, která se spočítá takto:

$$c_{p,m_1} = x_{\text{N}_2} \cdot c_{p,\text{N}_2} + x_{\text{O}_2} \cdot c_{p,\text{O}_2} + x_{\text{CH}_4} \cdot c_{p,\text{CH}_4} = \frac{8}{11} \cdot 29,12 + \frac{2}{11} \cdot 29,38 + \frac{1}{11} \cdot 35,69 = 29,76 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}.$$

Dostaneme tedy:

$$\Delta H_1 = 29,76 \cdot (298 - 473) = -5208 \text{ J mol}^{-1}$$

II) Při samotné reakci při 298 K se molární entalpie směsi změní o:

$$\Delta H_2 = x_{\text{CH}_4} \cdot \Delta H_{\text{sp}(\text{CH}_4)} = \frac{1}{11} \cdot (-891) \text{ kJ mol}^{-1} = -81\,000 \text{ J mol}^{-1}$$

III) V předchozím kroku vznikla z metanu kapalná voda, kterou musíme vypařit, protože v konečném stavu je v plynném skupenství. Abychom ale mohli spočítat teplo doprovázející toto vypaření za normálního bodu varu, musíme ji ohřát na příslušnou teplotu. Při tomto ohřevu se entalpie změní takto:

$$\Delta H_3 = c_{p,m_3} \cdot \Delta T_3, \text{ kde}$$

$$c_{p,m_3} = x_{N_2} \cdot C_{p_{N_2}} + x_{H_2O} \cdot C_{p_{H_2O(l)}} + x_{CO_2} \cdot C_{p_{CO_2}} = \frac{8}{11} \cdot 29,12 + \frac{2}{11} \cdot 75,33 + \frac{1}{11} \cdot 37,14 = 38,25 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}.$$

$$\text{Tedy } \Delta H_1 = 38,25 \cdot (373 - 298) = -2869 \text{ J mol}^{-1}$$

IV) Při vypaření veškeré vody v molu produktů při teplotě 373 K se entalpie změní o:

$$\Delta H_4 = x_{H_2O} \cdot \Delta H_{\text{vap}(H_2O)} = \frac{2}{11} \cdot (40,65) \text{ kJ mol}^{-1} = 7391 \text{ J mol}^{-1}$$

V) Teď už můžeme spočítat adiabatickou teplotu plamene, k čemuž nám pomůže následující úvaha: Protože jde o adiabatický děj, celkové teplo vyměněné s okolím je rovno nule. Protože je děj současně izobarický, je celková změna entalpie rovna vyměněnému teplu, tedy nulová. Odtud

$$\Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4 + \Delta H_5 = 0$$

$$\Rightarrow \Delta H_5 = -(\Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4),$$

kde ΔH_5 je změna entalpie doprovázející ohřev molu produktů z teploty 373 K (při které jsme vypařili vodu) na adiabatickou teplotu plamene T_{ad} , která je dána jako:

$$\Delta H_5 = c_{p,m_5} \cdot (T_{\text{ad}} - 373 \text{ K}), \text{ kde}$$

$$c_{p,m_5} = x_{N_2} \cdot C_{p_{N_2}} + x_{H_2O} \cdot C_{p_{H_2O(g)}} + x_{CO_2} \cdot C_{p_{CO_2}} \\ = \frac{8}{11} \cdot 29,12 + \frac{2}{11} \cdot 27,47 + \frac{1}{11} \cdot 37,14 = 29,55 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

Kombinací předchozího dostaneme:

$$T_{\text{ad}} = 373 \text{ K} + \frac{-(\Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4)}{c_{p,m_5}} \\ = \left(373 + \frac{-(-5208 - 81000 + 2869 + 7391)}{29,55} \right) = 2943 \text{ K}$$

- e) Předpokládáme, že molární tepelné kapacity nezávisí na teplotě. To je velmi hrubá aproximace, která není přijatelná pro takto velký teplotní interval (rozdíl přes 2000 K!). Výpočet by byl značně zpřesněn, kdybychom tuto závislost vzali v potaz tím, že bychom uvažovali tepelné kapacity jako funkce teploty. Zároveň předpokládáme, že děj je adiabatický, což též není pravda. Zaokrouhlování ale není aproximace. Nemá smysl počítat s přesností, kterou nejsme schopni měřit.

5. a) Proběhne-li expanze velmi rychle, můžeme uvažovat, že se teplo nestačí přenést z okolí do expandujícího plynu, a proto je děj adiabatický.
- b) Ze zákona zachování energie a z faktu, že děj je adiabatický, plyne, že vykonaná práce je rovna změně vnitřní energie plynu. Ta je z definice molární izochorické kapacity c_V dána výrazem

$\Delta U = c_V \cdot n \cdot \Delta T = -p\Delta V \Rightarrow c_V \cdot n \cdot (T_f - T_0) = p \cdot (V_f - V_i)$, kde T_f a V_f jsou konečná teplota, respektive objem.

V této rovnici jsou dvě neznámé, ale ze stavové rovnice ideálního plynu můžeme vyjádřit V_f jako funkci T_f , čímž dostaneme následující rovnici:

$$\begin{aligned} n \cdot c_V \cdot (T_f - T_0) &= -p \cdot \left(\frac{T_f \cdot n \cdot R}{p} - V_i \right) \\ (20,76 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \cdot (1 \text{ mol}) \cdot (T_f - 273,2 \text{ K}) \\ &= -(10^5 \text{ bar}) \cdot \left(\frac{T_f \cdot (1 \text{ mol}) \cdot R}{(10^5 \text{ bar})} - (2,839 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3) \right), \end{aligned}$$

jejímž řešením je $T_f = 204,8 \text{ K}$

Plyn se tedy ochladí o $237,2 - 204,8 = \mathbf{68,4 \text{ K}}$.

Pro tento výpočet nelze používat Poissonovy rovnice, neboť ty platí pro reverzibilní děj, kterým prudká expanze vody z děla rozhodně není. Tyto rovnice platí pro reverzibilní děj, protože při jejich odvozování z prvního termodynamického zákona a stavové rovnice ideálního plynu se předpokládá reverzibilní průběh děje. Na druhou, pokud někdo explicitně řekl, že je to aproximace, uznával jsem to.

- c) Předpokládáme, že děj je ryze adiabatický, že se vzduch chová jako ideální plyn s izochorickou tepelnou kapacitou nezávislou na teplotě. Pro zpřesnění výpočtu bychom mohli uvažovat složitější děj, který by nebyl ryze adiabatický a u nějž by se práce, teplo a změna všech stavových veličin řídily složitějšími závislostmi. Zároveň bychom mohli podobně jako výše uvažovat závislost tepelné kapacity na teplotě. Velkou aproximací je zanedbání tepla, které se uvolní mrznutím vody. Náš výsledek je tedy značně odlehklý, ale pro hrubý nástřel principu sněžného děla dostatečný. Těm z Vás, které by zajímalo, jak dojít k přesnějším výsledkům, bych doporučil studium literatury z oblasti chemického inženýrství.

Otázka 1 – 0,5 bodů, 2 – 1,5 bodů, 3 – 4 body, 4 – 3 body, 5 – 2 body. Celkem 11 bodů.

Seriál: Krátký výlet do mikrosvěta**3. díl: Třetí zastavení**

Autoři: Vojtěch Látl, Alan Liška

5 Struktura a symetrie molekul

V předchozích kapitolách jsme uvedli motivaci studia molekul a některé její koncepty a dotkli jsme se tématu molekulových orbitalů. Diskutovali jsme je jako jednu z teorií, které se s výhodou používají pro modelování chemické vazby. Chemická vazba je však dynamický systém, a jakékoliv naše modely tedy musejí respektovat geometrii molekuly, na níž jsou přímo závislé některé vazebné pohyby. Výhodným nástrojem, jak zahrnout do popisu vazeb, ale i pohybu molekul geometrické hledisko, je *teorie symetrie*. V následující podkapitole proto naznačíme, jak je teorie symetrie interpretována v chemii a jaká její použití jsou pro nás významná.

5.1 Úvod do teorie symetrie

Symetrii můžeme intuitivně chápat jako vlastnost určitých konkrétních objektů; i bez dalšího popisu bychom dobře rozuměli tomu, že koule je symetričtější než hranol, a ten než například hrnek na čaj. V mikrosvětě však musíme hovořit přesnou řečí, a navíc nás nebude zajímat symetrie hrnků na čaj, ale *symetrie molekul*. Ukážeme, že určité jejich vlastnosti, jako například struktura orbitalů, ale i některé pohyby, jsou ze symetrického hlediska nerozlišitelné, a budou se tedy chovat identicky. Toto pozorování nám umožní nejen nalézt správné řešení daného problému, ale v mnoha případech jej i výrazně zjednodušuje.

Teorie symetrie pracuje se dvěma základními pojmy, a jimi jsou *prvky symetrie* a *operace symetrie*. Typickými prvky symetrie jsou *rotační osy*, *roviny symetrie*, *střed inverze* a případně *rotačně-reflexní osy*.

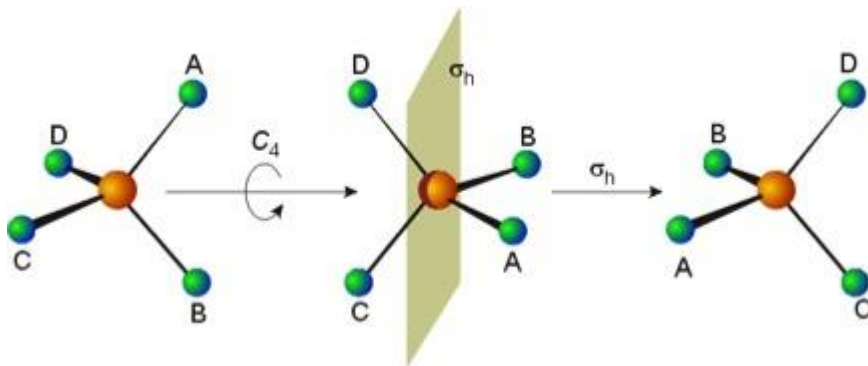
Rotační osa je osa, kolem které je možné molekulu otočit, aniž by se navenek změnila. Značí se symbolem C_n , kde n je četnost osy, tedy díl plného úhlu, o který otáčíme. Na obrázku níže ukážeme prvky symetrie molekuly vody, které obsahují rotační osu C_2 , kolem které otáčíme o $\frac{360^\circ}{n} = 180^\circ$. Ověřte, že molekula benzenu má rotační osu C_6 procházející středem molekuly kolmo na její rovinu. Je-li v molekule více os symetrie, označuje se osa s nejvyšší četností jako hlavní.

Má-li molekula *střed inverze* i , jde o bod, podle kterého je středově souměrná. Jednoduchým příkladem středově souměrné molekuly je ethen, jehož střed inverze leží uprostřed vazby $C = C$. Středově symetrické jsou také zcela pravidelné oktaedrické komplexy $[M(L)_6]$, kde M je středový atom a L ligandy. Středem inverze je centrální atom.

Roviny symetrie jsou roviny, podle kterých je molekulu možné symetricky zrcadlit. Pokud je předmětná rovina kolmá na hlavní osu, jde o rovinu horizontální σ_h , pokud v ní hlavní osa naopak leží, hovoříme o vertikální rovině σ_v . Speciálním případem vertikálních rovin jsou roviny, které půlí vazebné úhly a označují se jako roviny dihedrální, σ_d (pokuste se je sami nalézt například na modelu molekuly methanu).

Rotačně-reflexní osa je osa, kolem které se provádí složená operace rotace a zrcadlení, které popíšeme za okamžik; před tím uvedeme, co jsou *operace symetrie*.

Operace symetrie jsou operace, jejichž provedení umožňují dané prvky. V případě rotační osy je to tedy *otočení*, v případě středu inverze *zobrazení středovou souměrností* a v případě rovin symetrie *zrcadlení*. Zobrazení rotačně-reflexní osou S_n je složitější a provádí se jako zobrazení složené. Nejprve molekulu otočíme podél dané osy o příslušnou n -tinu plného úhlu a poté provedeme zrcadlení obecnou rovinou kolmou na tuto osu. Rotačně-reflexní osu S_4 lze nalézt například v tetraedrické molekule methanu; zobrazení, které přes ni provádíme, ukazuje následující obrázek.



Obrázek 13: Zobrazení molekuly methanu rotačně-reflexní osou S_4 ¹³

Na obrázku jsou atomy vodíku označeny jako zelené kuličky s písmeny A-D, aby bylo možné sledovat jejich pohyb. Vzhledem k tomu, že reprezentují shodné atomy, není možné odlišit konečný obraz molekuly od vzoru, což je smyslem symetrických zobrazení.

¹³https://sites.cns.utexas.edu/sites/default/files/styles/os_files_large/public/jones_ch431/files/fig3.jpg?m=1484252011&itok=VMSe-ZhK

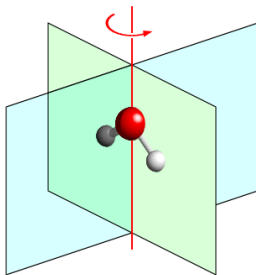
Můžeme si všimnout, že rotačně-reflexní osa se označuje S_4 , na obrázku jsou však nakresleny zvlášť operace C_4 (rotace kolem čtyřčetné osy) a $\sigma \perp C_4$ (zrcadlení kolmou rovinou). Můžeme tedy psát, že $S_4 = C_4 \circ \sigma$, kde znaménko $\circ$ značí *skládání operací symetrie* a jeho význam můžeme vypožorovat z obrázku. V rozebraném příkladu lze navíc pozorovat, že předmětná kolmá rovina obecně *není* rovinou symetrie daného objektu (σ_h , σ_v nebo σ_v'), ale pouze matematickým objektem, kterým si pomáháme při popisu dané významné operace symetrie.

Pokud bychom dali dohromady všechny možné operace symetrie pro danou molekulu, dostaneme jejich množinu, které se v matematice říká *grupa*. Pro konzistenci s matematickou definicí se tato takzvaná grupa symetrie doplňuje operací *identity*, která ponechává molekulu zcela nezměněnou. Pokud s pomocí operací obsažených v grupě symetrie zapíšeme, jak změní atomové orbitály všech atomů tvořících molekulu, dostaneme takzvanou *tabulku charakterů příslušné grupy symetrie*. Grupy symetrie se v chemii označují podle takzvané *Schönfliesovy notace*, která vychází z význačných operací v nich obsažených. Například grupa symetrie C_{2v} obsahuje jako význačných prvek rotační osu C_2 a dále identitu značenou E a dvě vertikální roviny symetrie σ_v a σ_v' , jak ukážeme níže.

Tabulky charakterů obsahují užitečný návod, jak kombinovat atomové orbitály za účelem sestavení orbitalů molekulových nebo zkoumání vazebných pohybů molekuly. Jejich interpretace je však při prvních použití poměrně obsáhlá, proto se vyhneme přesnému popisu a ukážeme je v obecném principu na příkladu. Čtenáře zběhlejší v jejich používání zde poprosíme, aby se pokusil o jejich řešení s pomocí tabulek charakterů dostupných v mnoha chemických databázích a srovnal své výsledky s našimi.

Teorie symetrie může být využita i k popisu vibračních pohybů molekul, kterým jsme se věnovali v modelu harmonického oscilátoru; řešený příklad je ukázán v repozitáři. Zde pro názornost a návaznost na následující kapitoly využijeme symetrii k sestavení jednoduchých *molekulových orbitalů*. Použijeme pro ně příklad, který nemusí být zcela typický, ale na němž budeme moci uvést některé postupy, které následně zobecníme. Půjde totiž o molekulový ion H_2O^+ .

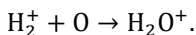
Prvním krokem ke správnému řešení jakékoliv podobné úlohy je nakreslení *úplného strukturního vzorce dané molekuly*. Budeme předpokládat, že ion H_2O^+ vznikl rychlým odtržením elektronu z molekuly vody, aniž by se změnila její geometrie. Struktura je pak stejná jako planární lomená geometrie molekuly vody. Z prvků symetrie v ní můžeme nalézt rotační osu C_2 a dvě vertikální roviny, rovinu molekuly σ_v a rovinu σ_v' , která je na ni kolmá. Situaci znázorníme na obrázku.

Obrázek 14: Molekulový ion H_2O^+ a jeho prvky symetrie¹⁴

Problém sestavit molekulové orbitály naší částice by se mohl jevit velmi složitým – potřebujeme totiž postihnout všechny možné interakce mezi orbitály atomu kyslíku a dvou atomů vodíku. Zde se však už velmi dobře uplatní teorie symetrie. Řekneme, že aby byla interakce daných orbitalů *účinná* a molekulový orbital mohl vzniknout, můžeme kombinovat pouze orbitály o *vhodné symetrii*.

Vhodná symetrie nemusí být totéž jako stejná symetrie, nebo dokonce stejný tvar. Abychom tedy nemuseli každou modelovou situaci možných kombinací studovat zvlášť, porovnáme, jak se chovají orbitály, pokud na ně aplikujeme možné operace symetrie molekuly. Orbitály, které se chovají stejně, pak ze symetrických důvodů můžeme kombinovat. V teorii symetrie, případně grup, bychom řekli, že takové skupiny *patří do stejné symetrické reprezentace*.

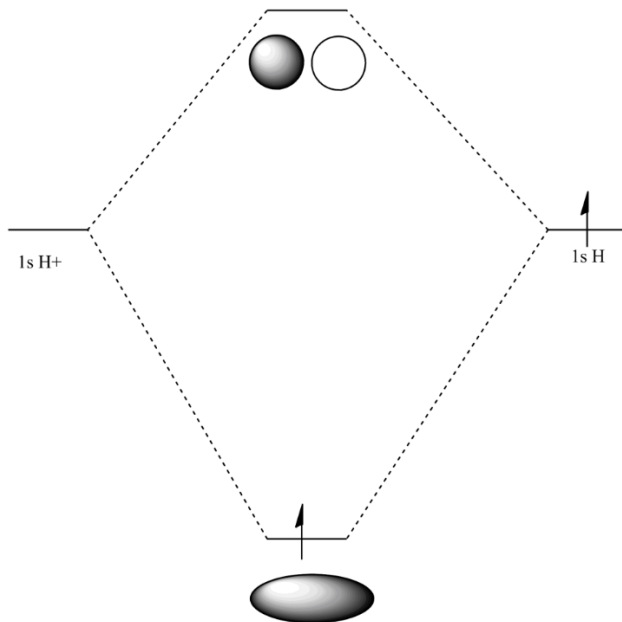
Než se pustíme do ukázky na našem konkrétním příkladu, provedeme ještě jedno zjednodušení. Pro sestavení molekulových orbitalů nás samozřejmě budou zajímat atomové orbitály kyslíku, tedy $2s$, $2p_x$, $2p_y$ a $2p_z$. Orbital $1s$ leží tak blízko k jádru, že ho molekulové interakce v našem případě ovlivní jen velmi málo a není nutné jej uvažovat. Zároveň bychom však mohli různě kombinovat atomové orbitály dvou atomů vodíku; abychom si zjednodušili práci, zkombinujeme je nejdříve do myšlené molekuly H_2^+ a sestojíme molekulu H_2O^+ , jako by vznikala myšlenou či skutečnou chemickou reakcí



Pokud se totiž na částici H_2^+ podíváme podrobněji, zjistíme, že je tvořena jedním elektronem a dvěma jádry atomů vodíku. Jádra obou atomů jsou v porovnání s elektronem velmi velká a těžká, a budou se tedy pohybovat řádově pomaleji. Pro potřeby chemického modelu tak můžeme říci, že se nepohybují vůbec, a získat tak problém dvou těles – jednoho elektronu a jednoho tělesa složeného ze spojených nehybných jader.

¹⁴ <https://www.quora.com/What-symmetries-are-found-in-water-molecules>.

Jak si pamatujeme z diskuse řešení Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku, systémy dvou těles lze řešit zcela přesně. Důsledkem tohoto řešení pro možnost znázornit pro ion H_2^+ tvar jeho molekulových orbitalů a jejich energii vzhledem k původním orbitalům atomovým, jak ukazuje na obrázku takzvaný *diagram molekulových orbitalů*.



Obrázek 15: Digram molekulových orbitalů iontu H_2^+

Můžeme si všimnout, že kombinací dvou atomových orbitalů vznikly dva orbitály molekulové. Jeden z nich má energii nižší než kterýkoliv atomový a nazývá se *vazebným*, druhý má energii naopak vyšší a jde o orbital *antivazebný*. Pro potřeby naší další práce je užitečné si všimnout tvaru obou z nich včetně znamének vlnové funkce, které jsou znázorněny tmavou a bílou barvou. Antivazebný orbital má uzlovou rovinu, vazebný nikoliv.

Nyní využijeme teorii symetrie, abychom z molekulových orbitalů iontu H_2^+ a atomových orbitalů kyslíku sestavili molekulové orbitály iontu H_2O^+ , které nás zajímají. Tvary molekulových orbitalů H_2^+ lze určit z diagramu výše, tvary atomových orbitalů kyslíku známe. Nakreslíme je s tím, že podle dohody se v teorii symetrie hlavní osa molekuly (zde její jediná osa, tedy osa C_2) ztotožní s osou z. Budeme se dívat, co se stane, pokud na orbitály aplikujeme po řadě všechny operace symetrie, které máme k dispozici, tedy E , C_2 , σ_v a σ_v . Uvedeme příklad.

Vazebný orbital H_2^+ označíme Σ . Pokud jeho tvar tak, jak je uveden na diagramu, otočíme o 180° , odzrcadlíme rovinou nákresny nebo rovinou k ní kolmou, dostaneme pořád ten samý tvar. Identita nechává jakýkoliv tvar beze změn, orbital Σ je tak *symetrický* proti všem operacím symetrie iontu H_2O^+ . Označme antivazebný orbital Σ^* a provedme stejné pozorování. Identita i zrcadlení rovinou nákresny (σ_v') jej ponechá beze změn, je tedy proti těmto operacím *symetrický*. Otočení o 180° a stejně tak zrcadlení rovinou kolmou na nákresnu (σ_v) však změni jeho znaménko; řekneme, že proti těmto operacím je *antisymetrický*.

V tabulce níže uvedeme výsledky stejných pozorování i pro atomové orbitály kyslíku. Znaménko (+) v tabulce značí symetrii proti dané operaci, znaménko (–) antisymetrii. *Doporučujeme, abyste si podobné vyšetření vyzkoušeli sami pro známé tvary atomových orbitalů kyslíku a srovnali své výsledky s našimi.*

Tabulka 1: Znázornění symetrie orbitalů atomu kyslíku a iontu H_2^+ proti možným operacím symetrie molekulového iontu H_2O^+

	E	C_2	σ_v	σ_v'
$2s\ O$	+	+	+	+
$2p_x\ O$	+	–	–	+
$2p_y\ O$	+	–	+	–
$2p_z\ O$	+	+	+	+
$\Sigma\ H_2^+$	+	+	+	+
$\Sigma^*\ H_2^+$	+	–	–	+

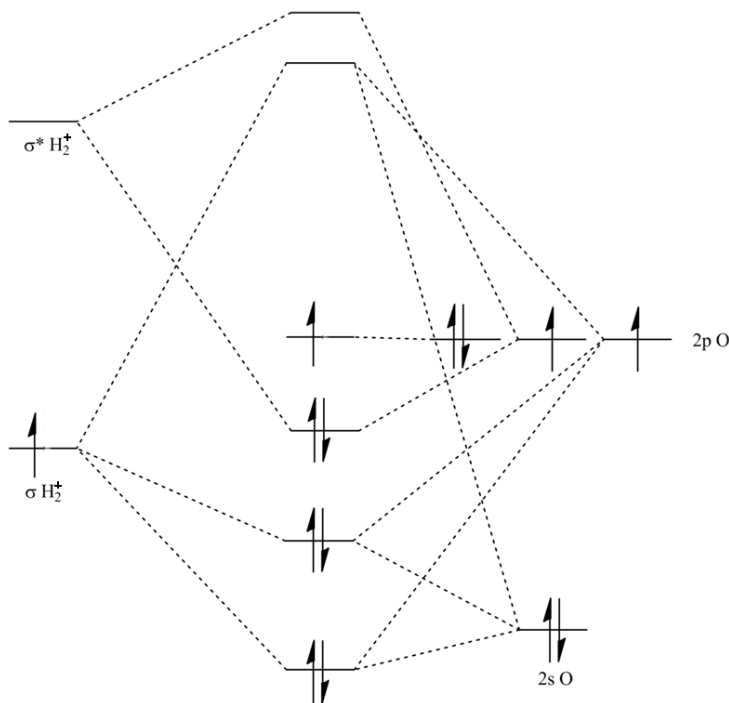
Můžeme si tedy všimnout tří skupin orbitalů, které spolu ze symetrických důvodů mohou účinně interagovat, **zelené**, **modré** a **šedé**. Dva orbitály v modré skupině zkombinujeme za vzniku dvou nových orbitalů podobně jako v diagramu výše. Interakcí orbitalů v zelené skupině vzniknou orbitály dokonce tři. Jak ukážeme na výsledném diagramu, jeden z nich bude mít energii výrazně nižší a jeden výrazně vyšší než jakékoliv původní. Půjde tedy o orbitály vazebné a nevazebné, jak jsme si jich všimli už v případě H_2^+ . Poslední ze tří očekávaných orbitalů se energií nebude výrazně odlišovat od původních hladin; takovéto orbitály se obecně označují jako *nevazebné*.

Vazebné orbitály se vyznačují nízkou energií, a vazba je jimi tedy *stabilizována*; chování antivazebných orbitalů je přesně opačné. Nevazebné orbitály se energeticky nijak distinktně nechovají, a na vazebné interakci se tedy budou podílet jen velmi málo až vůbec.

V šedé symetrické skupině (reprezentaci) se nachází jediný orbital $2p_y$, orbital atomu kyslíku. Vzhledem k tomu, že symetrické důvody mu pro danou strukturu

H_2O^+ neumožňují interagovat s žádným partnerem, a měnit tak svou energii, přejde do výsledného diagramu jako zcela nevazebný.

Poté, co jsme rozhodli, jaké orbitály můžeme kombinovat, zbývá diskutovat jejich energii. Protože řešení atomových orbitalů atomu kyslíku není z definice přesné, a ani předpoklad nehybných jader vodíku není úplný, jsou jejich jakkoliv (typicky dnes na počítači) stanovené hodnoty zatíženy inherentní nepřesností. Bude nám tedy stačit jejich relativní energii odhadnout, například tak, jak ukazuje diagram níže. Nejprve byly sestaveny molekulové orbitály a poté obsazeny elektrony tak, aby jejich počet odpovídal původně přítomným.



Obrázek 16: Diagram molekulových orbitalů molekulového iontu H_2O^+

Pouhým pohledem na sestavený diagram můžeme zjistit významnou vlastnost iontu H_2O^+ – částice obsahuje nespárovaný elektron, půjde tedy o takzvaný *kation-radikál* H_2O^+ , velmi reaktivní a nestálou částici. Tato vlastnost je užitečná pro studium chemie například elektrických výbojů v kapalinách nebo mezihvězdného prostoru, kde se hojně vyskytuje.

Zajíček chemik

