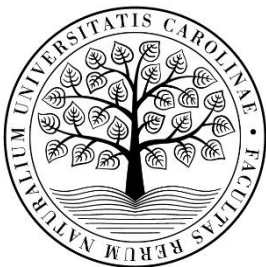




Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 21 (2022/2023)

Série 2



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 jí 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 21. 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 *Virální chemie* od Karla Berky, Jakuba Kriegera a Adama Tywoniaka. 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 úspěšní řešitelé mohou mít na vybraných vysokých školách odpuštěné přijímací zkoušky a získat motivační stipendium¹.

¹ Více informací najdete na webových stránkách KSICHTu.

**Termín pro odeslání řešení 2. série:
2. 1. 2023**

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, pokud 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 PDF². 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 této stránce elektronicky nebo papírově (rozhoduje čas na KSICHTím serveru 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 ověříš³.
4. Nezkopíruješ W'k'p_ed_{ii} českou ni anglickou ni v jazyku jiném psanou⁴.
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 číslíc z kalkulátoru svého⁵.
9. Nepožádáš o řešení bližního svého.
10. KSICHTí jméno důsledně šířiti budeš.

³ Smyslem korespondenčního semináře je také dát vám příležitost naučit se vyhledávat, třdit 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. kalkulátorový syndrom: „Svět byl stvořen za 6,9999999999942 dní.“ Toto není ani správná, ani přesná hodnota.

Úvodníček

Milé KSICHTáčky, milí KSICHTáci,

dušičkový čas, a snad i dušičková nálada je za námi. Pokud právě teď hledáte nevšední, a – jak doufáme – také zábavnou činnost pro prodlužující se podzimní dny, jsme tu v pravý čas s našim seminářem!

Hned v první úloze druhé letošní série máte příležitost vyzkoušet si výzkum v úplně novém vědním oboru. Úloha totiž nebude chemická, ale *KSICHTologická*. Řešení doporučujeme v každém případě, zvlášť užitečné může být pro seznámení se s některými organizátory ještě před výlety a soustředěním. Druhá úloha se podívá přímo do centra dění amerického potravinářského průmyslu. *Cholestra* na Vás čeká v angličtině a vypravíte se s ní do nedávné historie i do současné organické chemie. Na Vaše řešení se těšíme v angličtině, češtině i slovenštině. Experimentátoři a (nejen) začínající biochemici si přijdou na své v naší *Dentální úloze*. Pokud by Vám biochemie cukrů nešla od ruky hned, dozvíte se v úloze mimo jiné, že žvýkačky nepomáhají jenom na soustředění. S vyladěnou formou se doporučujeme vrhnout na některé ze schémat nebo grafů, které tvoří základ *Mechanistické úlohy*. Pochopíme ovšem, pokud se Vám nebude zdát dostatečně roztomilá; přesně z toho důvodu se na Vás v závěru brožurky chystají hned dvě zvířátka! Dozvíte se ledacos nejen *O kočkách a myších*, ale i o tom, jak v moderní chemii počítat.

Pokud byste narazili na jakékoliv potíže, beze všeho se na nás obraťte! Dotazy týkající se úloh směřujte na jednotlivé autory, technická a další podpora je Vám k dispozici prostřednictvím ksicht@natur.cuni.cz.

Na závěr mi dovoluje popřát Vám všem příjemně strávený čas nad seminářem!

Za všechny KSICHTy

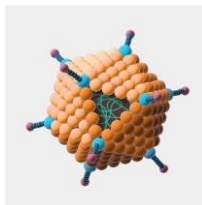
Vojta Laitl

Seriál: Virální chemie

Autoři: Karel Berka, Jakub Krieger, Adam Tywoniak

2. díl: Chemie virů

Na podzim a v zimě se s viry potká skoro každý z nás. Určitě průběh klasické virózy znáte – bolest v krku, rýma, kašel, únava⁶... To vše jsou vlastně spíš příznaky reakce našeho těla na virovou infekci, a ne chování viru jako takového. Ten se naopak snaží v podstatě o jediné – o šíření. A k tomu používá řadu speciálních virových chemických triků.



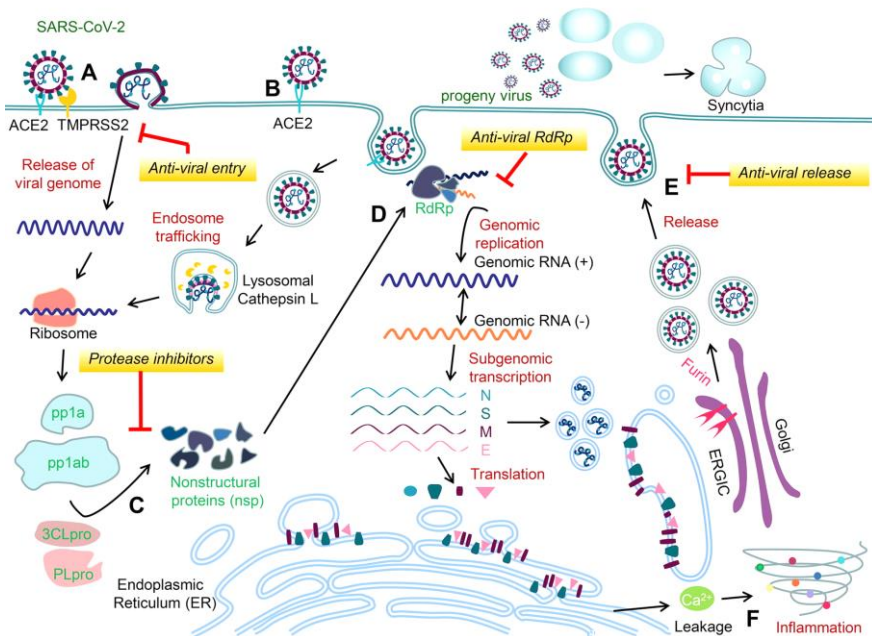
Životní cyklus viru

Viry samy nejsou živé objekty, ale i tak mají svůj životní cyklus, v rámci kterého se množí v hostitelských buňkách. Virus se ale na své cestě do hostitelských buněk setkává s mnoha překážkami. Tou hlavní jsou buněčné membrány. Plazmatická membrána představuje první bariéru, kterou musí všechny živočišné viry proniknout. Jaderná membrána pak představuje druhou bariéru pro viry, které replikují svůj genom v jádře. A viry tyto bariéry musejí v rámci svého životního cyklu překonat či obejít.

Životní cyklus viru lze rozdělit do tří fází – **vstup (viral entry)**, **replikace genomu (genome replication)** a **výstup (viral release)** (obrázek 1). Životní cyklus viru lze popsat analogicky s životem studenta; vstup připomíná cestu do školy, replikace genomu plnění studijních úkolů a konečně výstup cestu domů. A podobně, jako se překážky na cestě do školy projeví na studijních výsledcích, tak i u životního cyklu viru vyhledáváme procesy, které potřebuje ke svému šíření, a snažíme se je pak ovlivnit léčivý tak, abychom co nejméně zasahovali do našich buněk.

První fází cyklu je vstup do buňky. Vstup zahrnuje přichycení, při němž se částice viru setká s hostitelskou buňkou a přichytí se k jejímu povrchu, průnik, při němž se částice viru dostane do cytoplazmy, a rozbalení obalu, při němž se virus zbaví své kapsidy. Po rozbalení obalu je obnažený virový genom využit pro genovou expresi a replikaci virového genomu. Nakonec, když se nahromadí virové proteiny a virové genomy, jsou sestaveny do podoby virionové částice a poté extracelulárně uvolněny. Sestavení virionu a uvolnění z buňky představuje výstup a následuje hledání nových buněk k nakažení.

⁶ Tento text vzniká a jeho dodání je zpožděno také „pod vlivem“ (snad už) končící virové infekce.



Obrázek 1: Životní cyklus RNA viru SARS-CoV-2 se žlutě vyznačenými možnými terapeutickými cestami. Vstup do buňky probíhá po navázání na ACE2 buď za pomoci štěpení proteázou TMPRSS2 (A), nebo endozomální cestou (B). Následně se uvolní genom viru a za pomoci ribozomů vzniknou virové proteiny. Vzniklý virový polyprotein se musí naštěpit pomocí proteáz (C) na funkční proteiny, které se poskládají pro tvorbu komplexu zodpovědného za replikaci viru – tzv. RdRp (RNA-dependentní RNA polymerázy; D). Při replikaci vznikají také kratší neúplné sekvence, které ale mohou být předobrazem pro tvorbu virových proteinů. Virus tím řídí expresi jednotlivých proteinů tak, aby se společně s kopií RNA také poskládaly do vznikajících virových částic – virionů (E), které jsou pak vypouštěny z buňky s furinem-preaktivovaným Spike proteinem. Buňka se produkcí virů vyčerpá a po uvolnění iontů vápníku do okolí umírá, což může spustit zánětlivou reakci.

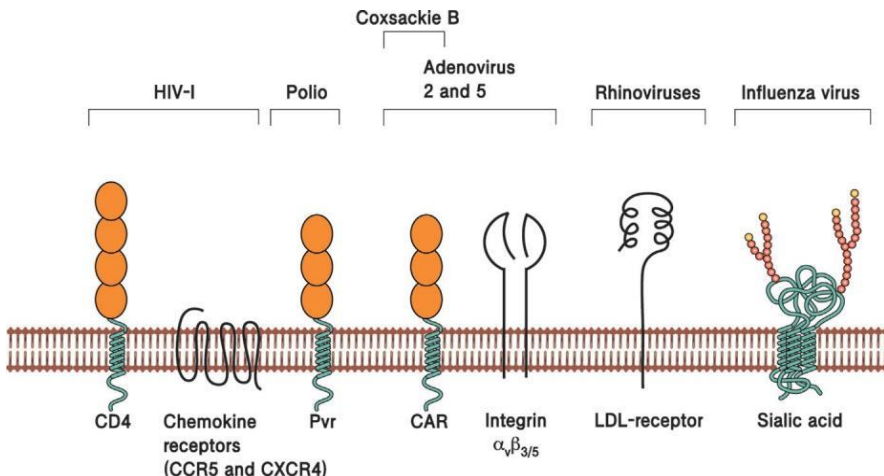
Převzato z Yin J, a kol. Advances in the development of therapeutic strategies against COVID-19 and perspectives in the drug design for emerging SARS-CoV-2 variants. *Comp. Struct. Biotech. J.* 20, 824-837, 2022.

Vstup viru do buňky

Vstup, první krok virové infekce, zahrnuje rozpoznání virového receptoru virovou částicí. Když hovoříme o virovém receptoru, myslíme tím receptor hostitelských buněk, který běžně slouží k rozpoznávání a přenosu tělu vlastních látek, ale viry ho zneužívají pro svůj vstup. Vstup viru lze rozdělit do čtyř kroků; jsou jimi připojení, průnik, cytoplazmatický přenos a rozbalení. Tyto kroky jsou často vzájemně propojeny, takže přesné rozdělení na čtyři části je nejasné a

experimentálně obtížně zachytitelné, ale nám dobře poslouží k vysvětlení celého procesu.

Virové receptory po navázání na virové částice podporují průnik virových částic do buněk. Existují virové receptory, které jsou specifické pro každý virus a určují tak tropismus buněk⁷. Během posledních tří desetiletí byly identifikovány téměř všechny virové receptory pro hlavní lidské patogenní viry (viz obrázek 2).



Obrázek 2: Virové receptory reprezentativních lidských patogenních virů. Rozpoznávají jsou především jejich extracelulární části. Žlutě je vyznačena část glykanu kyseliny sialové v membránových glykoproteinech. Pvr značí receptor pro poliovirus a CAR, receptor pro virus coxsackie a adenovirus. LDL je zkratka pro low-density lipoprotein, což je jeden z hlavních lipoproteinů přepravujících po organismu tuky. Chemokiny jsou skupinou malých signálních proteinů účastnících se imunitní reakce. Převzato z Wang-Shic Ryu. Molecular virology of human pathogenic viruses. Elsevier, 2017, <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-800838-6.00003-5>

- Molekulární povaha virových receptorů je poměrně rozmanitá, od glykoproteinů po fosfolipidy. Dokonce i sacharidová část membránových glykoproteinů je využívána jako virový receptor. Například zbytek kyseliny sialové a jejích glykanů tvoří vstupní receptorem pro virus chřipky.
- Většina virových receptorů má své vlastní buněčné funkce. Například fyziologickou funkcí LDL receptoru, vstupního receptoru určitého pikornaviru, je vychytávání LDL částic do buněk. Jinými slovy, viry zneužívají buněčné

⁷ Termín tropismus je odvozen z řeckého slova pro „otáčení“ – *tropos* – označujícího růst nebo otáčivý pohyb biologického organismu. V tomto kontextu označuje náchylnost buňky na danou virovou infekci.

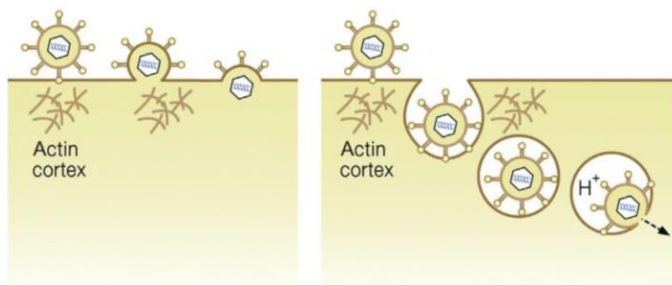
proteiny, které mají své fyziologické funkce, a využívají je jako vstupní receptory.

- Některé viry vyžadují ke svému vstupu kromě hlavních receptorů i koreceptory. Jako příklad uvedeme virus HIV, který může do buňky účinně vstoupit jedině s použitím chemokinových receptorů (CCR5, CXCR4 a jiné) jako koreceptoru (viz obrázek 2).

Důležité je, že přítomnost receptoru v dané buňce je určující pro vnímavost k určitému viru. Tropismus buněk je tedy do značné míry určen receptorem. Například přítomnost receptoru CD4 v pomocném lymfocytu T podmiňuje náchylnost k infekci HIV. HeLa buňka, která je jinak vůči HIV odolná, se stane náchylnou k infekci HIV, pokud je CD4 experimentálně exprimován.

Buněčné receptory rozpoznávají proteiny, které jsou na povrchu virů. V případě obalených virů se na receptory vážou glykoproteiny z virového obalu. Kupříkladu gp120 částice viru HIV se váže na molekulu CD4 cílových buněk. V případě virů bez lipidového obalu se jejich kapsidové proteiny mohou přímo vázat na receptor. Tímto způsobem se částice adenoviru váže na molekulu CAR na cílových buňkách.

Po uchycení virové částice na cílové buňky následuje průnik do cytoplazmy. Mechanismus pronikání se liší, ať už jde o obalený nebo neobalený virus. U obalených virů se používá jeden ze dvou následujících mechanismů: přímá fúze nebo receptorem zprostředkovaná endocytóza (ta je možná i u neobalených virů) – viz obrázek 3.



Obrázek 3: způsoby průniku virů do buňky. Vlevo je přímá fúze a vpravo pak endocytóza. Převzato z Wang-Shic Ryu, Molecular virology of human pathogenic viruses. Elsevier, 2017, <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-800838-6.00003-5>

Přímá fúze: Jde o mechanismus, při kterém dochází ke spojení dvou membrán (tj. virového obalu a buněčné membrány). V tomto případě se virová nukleokapsida (kapsida s nuklovou kyselinou uvnitř) dostane přímo do cytoplazmy a virový obal zůstane na plazmatické membráně. Zástupcem virů, které pronikají přímou fúzí, jsou retroviry.

Receptorem zprostředkovaná endocytóza: Přestože některé viry pronikají do cytoplazmy přímo přes plazmatickou membránu, jak je popsáno výše, většina virů je závislá na procesu označovaném jako receptorem zprostředkovaná endocytóza. Po zachycení virové částice na receptoru spustí komplex virová částice-receptor endocytózu vytvořením obalené jamky na plazmatické membráně, což vede k vytvoření membránového váčku, tzv. endosomu. V důsledku toho se virová částice nachází uvnitř endosomu. Dalším krokem je rozbití endosomu umožňující průnik viru do cytoplazmy. Proces rozpadu endosomu se liší podle toho, zda jde o obalený či neobalený virus. U obalených virů způsobuje rozpad endosomu fúze mezi virovým obalem a endosomální membránou vyvolaná kyselým pH v endosomu. U neobalených virů je rozpad endosomu vyvolána jedním z jeho kapsidových proteinů.

Prostřednictvím receptorem zprostředkované endocytózy vstupuje do buňky většina virů. Jaké jsou tedy výhody endocytózy zprostředkované receptorem oproti přímé fúzi? Na rozdíl od přímé fúze zřejmě receptorem zprostředkovaná endocytóza obchází aktinovou kůru (*cortex*) nebo síť mikrofilamentů v kůře, která představuje překážku pro průnik. Kromě toho se živočišné viry díky vychytávání endocytózou mohou vyhnout opuštění virového obalového glykoproteinu na plazmatické membráně jako při přímé fúzi, což pravděpodobně způsobuje zpoždění v detekci imunitním systémem.

Po úspěšném průniku se virové částice musí v buňce dostat na vhodné místo, kde mohou zreplikovat svůj genom. Tento proces se označuje jako intracelulární obchodování (*intracellular trafficking*). Biologický význam cytoplazmatického přenosu si ve skutečnosti nikdo neuvědomil až do vynálezu technologie zobrazování živých buněk. U virů, které se replikují v cytoplazmě, musí být virové nukleokapsidy směřovány do místa replikace. Ve skutečnosti je mechanismem transportu přenos zprostředkovaný mikrotubuly ve spojení s receptory zprostředkovanou endocytózou. Pokud se však viry replikují v jádře, musí se jejich virové nukleokapsidy dostat až do jádra. U mnoha DNA virů jsou virové nukleokapsidy směřovány do blízkosti jádra prostřednictvím transportu zprostředkovaného mikrotubuly. Při tomto procesu pohání pohyb virových částic „molekulární motor“, protein dynein. Analogicky si lze virové nukleokapsidy představit jako vlak na železnici.

Jak se virové částice přibližují k místu replikace, od periferie buňky k perinukleárnímu prostoru, je virový genom vystaven buněčným mechanismům pro expresi virových genů, což je proces označovaný jako *uncoating*. *Uncoating* je často spojován s endocytickou cestou nebo cytoplazmatickým přenosem. U v jádře se replikujících virů musí virový genom proniknout do buněčného jádra tzv. jaderným pórem. Využívá se více různých strategií, které do značné míry závisí na velikosti jejich genomu. U virů s menším genomem, jako je polyomavirus, vstupuje

do jádra celá virová kapsida. U virů s větším genomem způsobí dokování nukleokapsidy ke komplexu jaderného póru částečné narušení kapsidy (například u adenoviru) nebo vyvolá drobnou změnu virové kapsidy (například herpes viru), což umožní průchod genomu DNA do jádra.

Expres virových genů a replikace genomu

Strategie replikace virového genomu se mezi jednotlivými rodinami virů liší. Ve skutečnosti je mechanismus replikace genomu tím, co určuje identitu každé virové rodiny, jak jsme probrali minule. Kromě toho se liší i míra, do jaké jednotlivé rodiny virů spoléhají na hostitelské mechanismy, od těch, které jsou zcela závislé na hostitelských mechanismech, až po ty, které jsou zcela nezávislé. Všechny viry bez výjimky jsou však při syntéze proteinů zcela závislé na translačním aparátu hostitele, ribosomech, ale velmi rády si je svými vlastními proteiny specificky upraví, aby měly jejich proteiny přednost při translaci a jejich mRNA nebyla buňkou degradována..

Výstup viru z buňky

Výstup lze rozdělit do tří kroků: sestavení kapsidy, uvolnění a zrání.

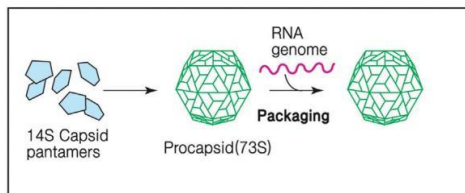
Výstup viru z buňky začíná sestavením kapsidy, kde se hojně hromadí virový genom i virové proteiny. Sestavení kapsidy lze rozdělit na dva procesy: sestavování vlastní kapsidy a balení genomu. V závislosti na viru mohou tyto dva procesy probíhat postupně nebo současně ve spojení (viz obrázek 4). Pikornavirus je příkladem prvního z nich, zatímco adenovirus je příkladem druhého.

V případě pikornaviru se nejprve sestaví nezralé kapsidy neboli prokapsidy, tedy kapsidy bez RNA. Následně je genom RNA zabalen nebo vložen prostřednictvím póru vytvořeného ve struktuře prokapsidy. Naproti tomu v případě adenoviru je sestavení kapsidy spojeno s balením genomu DNA. Pak vyvstává otázka, jak virus selektivně balí virový genom? Balicí signál je specificky rozpoznán virovými kapsidovými proteiny, které selektivně balí buď RNA, nebo DNA.

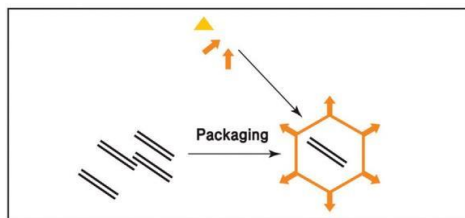
V případě neobalených virů se virové částice uvolňují prostřednictvím buněčné lýzy infikovaných buněk. Není tedy nutný žádný specifický mechanismus výstupu, protože buněčná membrána, která zachycuje sestavené virové částice, je demontována. Příkladem neobalených virů jsou polyomaviry (tj. SV40) a adenoviry.

Pokud jde o membránu pro obal, využívají se dvě buněčné membrány. Plazmatická membrána je místem obalu pro některé viry, například retrovirus a virus chřipky, zatímco endosomy, například endoplazmatické retikulum (ER) a Golgiho tělíska, jsou místem obalu pro jiné viry (herpes virus, virus hepatitidy B a jiné).

(A) **Sequential mechanism**



(B) **Concerted mechanism**



Obrázek 4: Vztah mezi sestavením kapsidy a balením genomu. (A) Sekvenční mechanismus. U pikornavirů je prokapsida, předstupěň kapsidy, předem sestavena bez genomu RNA. Následně RNA genom proniká do prokapsidy prostřednictvím póru. (B) Spřažený mechanismus. U adenoviru je genom DNA zabalen do kapsidy během jejího sestavování. Převzato z Wang-Shic Ryu, Molecular virology of human pathogenic viruses. Elsevier, 2017, <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-800838-6.00003-5>

Jak se tedy viry z infikovaných buněk uvolňují? Většina obalených virů se uvolňuje extracelulárně prostřednictvím exocytózy; často se tento proces nazývá také pučení, jako analogie tvorby pupenů u rostlin.

Posledním krokem při sestavování virových částic je „zrání“, proces, který probíhá extracelulárně po uvolnění z infikované buňky. Při zrání se jednotlivé komponenty uvnitř virových částic správně poskládají, aby mohly plnit svou funkci. U pikornavirů a retrovirů je zrání nezbytným krokem k získání infekčnosti. V případě retroviru je štěpení polyproteinu Gag virovým proteinem PR (aspartátová proteáza), ke kterému dochází v uvolněném virionu, doprovázeno i značnými morfologickými změnami, jako je kondenzace kapsidové struktury. Zrání tak propůjčuje částicím jejich infekčnost.

Závěr

Závěrem Vám přeji, aby Vám viry neuzrály a potkaly Vás co nejméně, a abyste se tudíž jejich životního cyklu nemuseli moc účastnit. Ale protože teď už víme, že viry používají spoustu proteinů, které jsou tělu nevlastní, tak se tyto proteiny dají použít i jako terapeutické cíle a lze navrhnout léčiva k jejich zablokování. Ale o tom zase až příště. Hepčí!

Zadání úloh 2. série 21. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Ksichtologická

(10 bodů)

Autor: Tomáš Heger



*Uhodí-li tě někdo přes pravou tvář, nastav mu i levou.
(Matouš 5:39)*

Lidský mozek je uzpůsobený k tomu, aby rozpoznal enormní množství lidských tváří. Evolučně to bylo výhodné, a i dnes se nám tato dovednost hodí. Naproti tomu rozpoznávat a určovat abstraktní předměty, dejme tomu prvky a molekuly, je pro nás těžší, jelikož si je hůře spojujeme s něčím konkrétním. Ale co takhle využít naší mozkové kapacity k propojení tváří a prvků, a vytvořit si takové periodické pexeso za pomoci tváří?

Než se na to vrhneme, podívejme se na tvář jako takovou. Jak jistě víte, skládá se z určitých struktur; biologové jim říkají tkáně. A jelikož v realitě jen těžko někomu nahlédneme „pod kůži“, zajímá nás u tváře především její povrch.

1. Jak se jmenují tři vrstvy tkání v kůži naší tváře? Pro každou z nich vyjmenujte alespoň jednu molekulu nebo látku, která je v ní hojně zastoupena, a určete její funkci v dané vrstvě.

Tak už víme, co je zač skutečná tvář. Nás ale teď zajímají jednotlivé její aspekty – řekněme jim třeba ksichtologické parametry. Když se na něčí tvář podíváte a chcete ji přiřadit nějaké parametry, jaké jsou její nejvýraznější rysy? Čeho si všimnete jako prvního?

2. Na následujícím odkazu: [Látky-Ksichto-logická](#) nebo na konci této úlohy naleznete několik relativně stabilních molekul, ve kterých jsou všechny prvky nahrazené lidskými tvářemi.
 - a) Zkuste najít alespoň tři dobře rozpoznatelné ksichtologické parametry, kterými se jednotlivé tváře liší. Jinými slovy, jaké parametry tváře by se daly spojit s parametry reálných prvků? Co by tyto parametry mohly znázorňovat za trend nebo vlastnosti v rámci periodické soustavy? Nebojte se vyvozovat závěry i z tvarů zachycených molekul, a prozatím si nevěšmejte struktury, které nejsou přirozenou částí lidského těla. Použijte třeba i znalosti o standardních stavech prvků, které jste odhalili!
 - b) Jedna z vyobrazených látek nemá zakreslené atomy jednoho prvku, protože je zakreslena v tzv. kosterním vzorci. O jakou látku jde a které atomy v ní nejsou zakreslené? K čemu se konkrétně používá?
 - c) Pojmenujte vyobrazené molekuly systematickým názvem.

3. Popište, jak by na základě vámi určených parametrů vypadal obličej, který by reprezentoval helium.

Mezi ksichtologické parametry, které zatím nebyly nikde použity, bychom mohli zařadit i některé umělé struktury, které si na tvář doplňuje člověk sám. Nás nyní bude zajímat přítomnost septa (kruhu v nose). Formulujme hypotézu, že septum reprezentuje výparnou entalpii (ΔH_{vap}). Ta je pro daný prvek specifická, a tak by nám její zjištění mohlo pomoci. Budeme také předpokládat, že je nezávislá na teplotě.

4. a) Vypočítejte výparnou entalpii bromu (Br_2), jestliže znáte následující údaje: při standardní teplotě 25 °C je tlak syté páry nad kapalným bromem 228 Torr, při teplotě o 50 °C vyšší je tento tlak roven 1,69 bar.

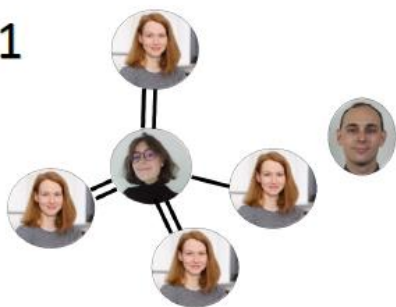
Tip: Může se vám hodit Clausiova–Clapeyronova rovnice, což je něco jiného než Clapeyronova rovnice (ta pro řešení není vhodná).

- b) Pokud řekneme, že 1 mm obvodu septa odpovídá energii výparné entalpie rovné 1,5 kJ mol⁻¹, jaký průměr by mělo septum v nose osoby, která by reprezentovala brom? Je taková ozdoba tváře reálně proveditelná?

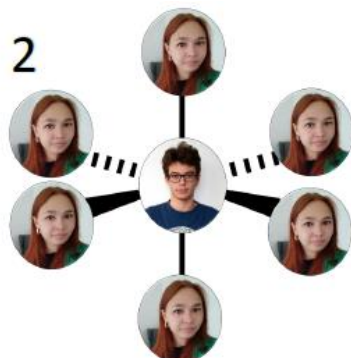
Velká část lidí bohužel není spokojená se svou ksichtologickou parametrizací. Proto je populární využívání různých metod jak změnit svůj vzhled, nejlépe přímo na úrovni samotných buněk.

5. a) V 80. letech se začala používat nová látka známá například pod komerčním jménem Vistabel. Co je její účinnou složkou a jak tato látka ovlivňuje vzhled člověka?
- b) Bakterie *Clostridium tetani* produkuje látku, která je relativně blízká účinné látce obsažené ve Vistabelu. Proč se ale produkty této bakterie nepoužívají v kosmetickém průmyslu?
6. Jaký parametr byste přidali do ksichtologické soustavy prvků? Vybírejte parametr popisující lidský obličej tak, aby z profilu tváře určoval vlastnost prvku či skupiny prvků. Ksichtologie je nový vědní obor, takže veškeré smysluplné návrhy jsou vítané a kladně hodnocené.

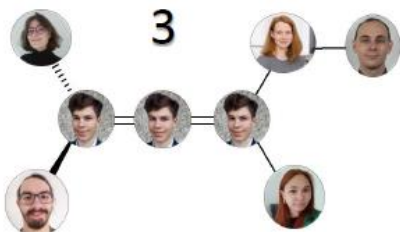
1



2



3



4



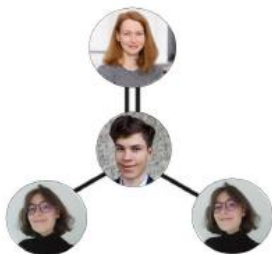
5



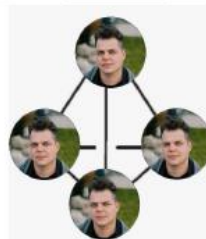
6



7



8



Problem n°2: Cholestra

(9 points)

Author: Jakub Nierostek



In the 1990s, a fat-free fat substitute Olestra developed by Procter & Gamble was approved for commercial use. Its advantages seemed too good to be true. It tasted and smelled like regular sunflower oil but contained no calories. As it was thermally stable, it could be used for (deep)frying. Big food producers (such as the Lays chips manufacturer) started to use the substitute and it was believed that Olestra would soon replace a major part of the

vegetable oil (VO) consumption. It had one tiny disadvantage though. As the media-hyped substitute was used more and more, people started reporting a certain problem... Apparently, its consumption caused anal leakage. Soon the media and [pranksters](#) caught up with it and the blow to the substitute's reputation eventually led to its disappearing from the market. While no longer used (and banned in the EU), the chemistry of Olestra is interesting. Let us explore it.

1. Draw the general molecular formula of Olestra (with fatty acid substitutes denoted as $-R$) and mark the chiral carbons.
2. What kind of lipid compound is it (glycolipid, sphingolipid, etc.)? What constitutes its backbone?

Although Olestra is a lipid, it cannot be normally digested by the pancreatic lipase enzyme in the small intestine.

3. Explain why the molecule cannot be digested.

Industrially, Olestra is synthesized *via* Fisher esterification using the reactive distillation process.

4. Sketch a reactive distillation column, label its parts and explain the purpose of the rectification section. What is reactive distillation? Name two types of organic reactions for which reactive distillation is used industrially.
5. Draw a reaction mechanism of attaching a fatty acid onto the Olestra backbone *via* the esterification reaction.

The public outcry sprang a whole branch of research regarding fat substitutes. Experiments conducted by Susan E. Swithers *et al.* [1] (doi:[10.1037/a0024404](https://doi.org/10.1037/a0024404)) suggest that feeding mice with both regular and fat-free chips surprisingly leads to bigger weight gain over time than if the mice are fed only the chips fried in regular fat.

6. How do the authors explain the increased weight gain in mice fed with fat-free chips?

Surprisingly, consumption of Olestra can also have positive health effects. This brings us to Anniston, Alabama, where Monsanto Corporation's biggest manufacturing plant for producing poly-chlorinated biphenyls (PCB) was located between 1929 and 1971. PCBs are toxic lipophilic compounds which tend to accumulate in the human body and cause chronic health problems, such as hypertension and diabetes. After the US banned PCB manufacturing in 1979, on-site investigations identified PCB contamination in soil, surface water and groundwater.

Previous research suggested that consumption of nonabsorbable lipids, such as Olestra, may help the excretion of polar toxins in animals. Jandacek. R et al. [2] (doi: [10.1016/j.jnutbio.2014.01.002](https://doi.org/10.1016/j.jnutbio.2014.01.002)) conducted a study in Anniston by having its inhabitants consume Olestra chips regularly and monitoring their PCB blood level over 5 years.

7. Read the article and decide which of the following statements hold true.

- Concentration of select pesticides in the participants' blood was measured alongside the concentration of PCBs.
- Participants in the Olestra group were more obese than participants in the vegetable oil group.
- The researchers supposed that the excretion rate of PCBs was kinetically a first-order reaction.
- After one year of the study, less than 20 % of participants dropped out.
- After 12 months, the blood concentration of PCBs in the Olestra group decreased more than by 20 % on average.
- After the study ended, participants of the Olestra group had higher cholesterol levels than at the beginning of the study.

Solutions of this problem set can be submitted in Czech, Slovak or English language.

Úloha č. 3 Dentální

(9 bodů)

Autor: Jakub Krieger



Většina z nás slýchávala již v dětství, že zuby se mají čistit nejlépe po každém velkém jídle, čili třikrát denně. Američtí dentisté ale nyní přišli s tvrzením, že čištění zubů bezprostředně po jídle vlastně není vhodné, naopak je velmi nebezpečné⁸.

Nedávno jsem na doporučení zubaře navštívil dentální hygienu. Kromě spousty jiných zajímavých informací jsem se dozvěděl, že si nemám zuby čistit ihned po jídle, neboť jídlo způsobuje kyselé pH ústní dutiny. Následné mechanické namáhání pak může způsobit rozleptání zubní skloviny. Ale proč by všechna jídla měla způsobovat nízké pH? Zdálo se mi to až moc jednoduché, a tak jsem se tomu rozhodl podívat na zoubek.

pH samotné potraviny, kterou konzumujeme, má zajisté na pH v ústní dutině vliv. Mnohdy je ovšem daleko důležitější, co se děje v ústní mikroflóře.

1. Uveďte latinský název nejvýznamnější bakterie, která je součástí ústní mikroflóry a je zodpovědná za snížení pH v ústní dutině.

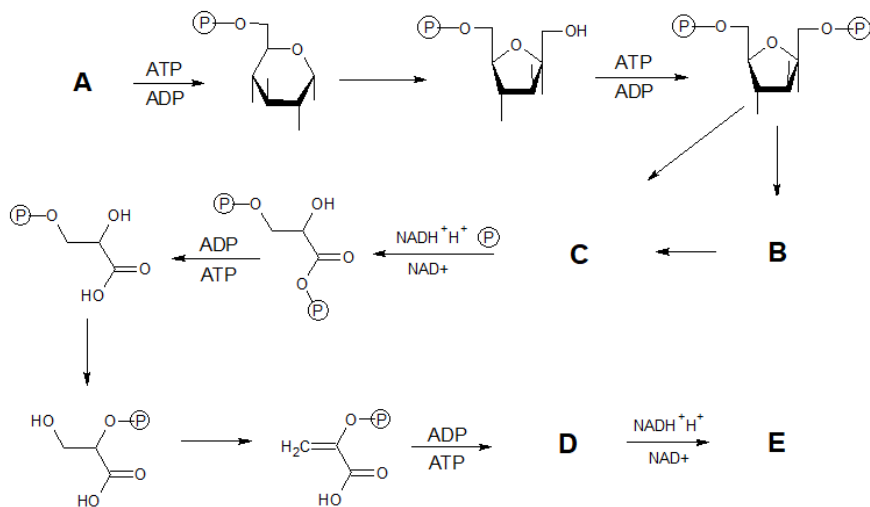
Metabolickým procesem znázorněném na obrázku 1 tyto bakterie přeměňují látku **A** na látku **E**.

2. a) Jak se jmenuje metabolický proces přeměny látky **A** na látku **D** znázorněný na obrázku 1? Napovíme, že stejný proces probíhá i uvnitř našich buněk, ale za aerobních podmínek. I přeměna látky **D** na látku **E** probíhá v našem těle, konkrétně ve svalch při nadměrné fyzické zátěži.

b) Nakreslete strukturní vzorce látek **A–E** a pojmenujte je.

Bakterie v ústní dutině přežívají na zubním plaku, což je velmi složitý biofilm. My si jeho tvorbu zjednodušíme na 3 stěžejní kroky. V prvním kroku se na zubní sklovinu nalepí (tzv. adherují) proteiny a glykoproteiny ze slin.

⁸zdroj: <https://www.novinky.cz/zena/zdravi/clanek/cisteni-zubu-ihned-po-jidle-je-nebezpecne-156723>



Obrázek 1. Schéma metabolického procesu, kterým bakterie v ústní dutině produkují kyselinu E

3. a) Na jakou aminokyselinu jsou bohaté glykoproteiny umožňující adhezi bakterií?

V druhém kroku se na vzniklé pelikule přichytí ústní bakterie, včetně našeho oblíbence z otázky 1. Ten navíc dokáže vytvářet lepkivé struktury, ve kterých může dlouhodobě přežívat.

b) Jak se nazývají látky, které tvoří tuto strukturu?

c) Díky jakému enzymu jsou bakterie tyto látky schopné tvořit?

Z otázky 2 už víte, co způsobuje nízké pH v ústní dutině po jídle. Jaké to má ovšem důsledky pro Vaše zuby?

4. a) Napište název a sumární vzorec hlavní složky zubní skloviny F.

b) Napište rovnici chemické reakce, které látka F podléhá v kyselém prostředí.

Jeden ze způsobů, jak této nežádoucí reakci předcházet, je čištění zubů zubní pastou. Určitě jste zaznamenali, že do zubních past se přidává fluorid.

5. Proč? Jaký má fluorid účinek na zuby? Napište chemický vzorec látky, která se na zubech reakcí s fluoridem tvoří.

Efekt snížení pH po jídle pozoroval již R. M. Stephan v roce 1944. Po něm jsou také pojmenovány tzv. Stephanovy křivky, což jsou grafy závislosti pH slin na čase po jídle.

6. Nakreslete typický tvar Stephanovy křivky.

Zatím jsme se vůbec nezmínili o slinách a jejich vlivu na pH v ústní dutině. Sliny mají ve vztahu k regulaci pH dvě hlavní funkce: jednak odplavují vznikající kyselinu **E**, jednak ji neutralizují díky své pufrací kapacitě.

7. Co by se stalo, kdybychom po jídle zamezili toku slin? Nakreslete, jak by podle vás vypadala Stephenova křivka. Svoje rozhodnutí stručně zdůvodněte.

Na pufrací kapacitě slin se podílí zejména fosforečnanové a hydrogenuhličitanové ionty, ale velkou roli hrají také dusíkaté báze.

8. Napište název látky **G**, kterou byste spíše než ve své ústní dutině čekali v moči. Popište chemickou rovnici děj, díky kterému z látky **G** vzniká jednoduchá dusíkatá báze.

Tok slin i jejich pufrací kapacitu tělo využívá cíleně. Proto se zvýší produkce slin, když žvýkáme.

9. Jak se změní Stephenova křivka (v porovnání s křivkou z otázky 6), pokud budeme po jídle žvýkat žvýkačku?

10. Do žvýkaček se jako sladidlo přidává látka **H**, u které je prokázáný vliv na snížení tvorby zubních kazů.

a) Napište název a nakreslete strukturní vzorec látky **H** ve Fischerově a v Haworthově projekci.

b) Díky čemu má látka **H** tento pozitivní účinek?

Nyní už chápete mnohé z faktorů, které ovlivňují pH ústní dutiny. Pro Vás by však možná bylo zajímavější zjistit, jak jste na tom s pH ústní dutiny po jídle zrovna Vy. Nemusíte se bát, právě od toho tu jsme.

11. V obálce jsme Vám společně s brožurkou zaslali 2 pH papírky. Vaším úkolem bude s jejich pomocí proměřit pH Vašich slin po konzumaci Vámi vybraného pokrmu a sestavit Stephenovu křivku.

- Oba pH papírky rozstříhnete podélně na 3 tenké proužky, abyste mohli provést celkem 6 měření.
- Měření provádějte odplivnutím na čistou lžičku nebo do čisté nádoby a následně vložením pH papírku do kapky slin na dobu 3 sekund. V žádném případě nestrkejte pH papírky do pusy!

- Naměřte pH před konzumací a zaznamenejte čas měření. Minimálně dvě hodiny před měřením byste neměli nic jíst ani žvýkat.
- Změřte pH Vašich slin v časech 1, 5, 10, 20 a 30 minut po jídle a запиšte je. V tomto čase nepijte ani nežvýkejte.
- Šest vámi použitých pH papírků vyfoťte spolu s aktuální KSICHTí brožurkou a pošlete na KSICHTí e-mail⁹. Naměřená data zpracujte v tabulkovém editoru (např. MS Excel) jako spojnicový graf. Graf by měl být opatřený správně popsányými osami.
- Pokud řešení odevzdáváte elektronicky, vložte graf do odevzdaného souboru jako obrázek. Pokud odevzdáváte řešení písemnou formou, můžete graf zpracovat ručně nebo ho poslat vytištěný.
- Naměřené hodnoty zadejte do Google formuláře¹⁰.

K měření využijte indikační stupnici na obrázku 2 (barevná je v elektronické podobě).



Obrázek 2: Stupnice pH papírků značky Kompava

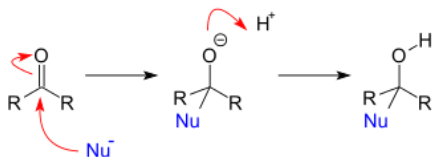
12. Na základě teoretických poznatků z této úlohy se pokuste interpretovat tvar Vámi naměřené křivky – navrhněte, jaké procesy by mohly být zodpovědné za její jednotlivé úseky.

⁹Fotky o maximální velikosti 2 MB pošlete na jakub.krieger@ksicht.natur.cuni.cz. Do předmětu e-mailu napište Dentální - Jméno Příjmení.

¹⁰Na odkazu zde: <https://forms.gle/QTcHpc4R4J2aedwk6>

Úloha č. 4: Mechanistická**(12 bodů)**

Autor: Vojtěch Laitl



Mechanismus reakce nelze napsat na papír, musí být potvrzen experimentálně.

(jistá vysokoškolská skripta organické chemie)

Jednou z významných oblastí syntetické chemie je studium reakčních mechanismů, tedy průběhu přeměny reaktantů na kýžené produkty. V této úloze se podíváme na to, jak k řešení mechanistických úloh využít jednu z oblastí fyzikální chemie – spektroskopii. Nadto se pokusíme o něco, co je podle citovaných skript nemožné – napsat reakční mechanismus na papír!

Začneme představením způsobu, jakým se budeme snažit reakční mechanismy zapisovat. Celou reakci, již máme za úkol studovat, si nejprve rozdělíme na jednotlivé kroky, jejichž průběh jsme schopni jednoznačně popsat.

1. Podívejme se na příklad dvoukrokového mechanismu na úvodním obrázku.

- Pokuste se stručně vystihnout, k čemu dochází v jednotlivých krocích.
- Jaké sloučeniny se mohou například skrývat pod označením Nu^- ?

Abychom nemuseli jednotlivé kroky složitějších mechanismů popisovat slovně, používáme pro snazší orientaci zahnuté šipky. Dohodnutý způsob jejich znázorňování se mírně liší podle toho, jestli jde o radikálovou reakci nebo reakci molekul se spárovanými elektrony¹¹. Zde se omezíme na reakce, v nichž nebudou vystupovat radikály. Zahnuté šipky v takovýchto mechanismech kreslíme tak, aby směřovaly od volného elektronového páru reagující částice k atomu, se kterým reakční partner vytváří vazbu. Abychom je tedy mohli znázornit správně, potřebujeme znát elektronovou strukturu reagujících částic.

2. Mechanismus uvedený na úvodním obrázku není znázorněn zcela správně. Překreslete jej s doplněním všech volných elektronových párů, a tedy správnějším zakreslením zahnutých šipek. Předpokládejte, že částice Nu^- nese dva volné elektronové páry.

Syntetický chemik však typicky stojí před náročnějším problémem. Mechanismus zcela nových reakcí nebývá známý, a musíme se tedy spolehnout na znalost struktury reaktantů a produktů, které připravíme. Pomocí nich se pak

¹¹ Viz například řešené příklady na

https://chem.libretexts.org/Ancillary_Materials/Reference/Organic_Chemistry_Glossary/Mechanism.

můžeme pokusit identifikovat případné reakční meziprodukty a přeměny mezi nimi. Často tedy vycházíme ze sumární rovnice, i když v organické chemii nemusí být nejvhodnějším zápisem.

3. Zapište reakci ukázanou na úvodním obrázku souhrnnou rovnicí. Pokuste se zdůvodnit, proč takovýto zápis není v našem případě nejvhodnějším popisem reakce.

Při chemických reakcích vznikají směsi reaktantů, případných meziproduktů a produktů reakce, jejichž složení se v čase mění. Právě o tomto chování můžeme získat detailní informace s využitím spektroskopie. Tato disciplína nám umožňuje sledovat průběh reakcí, a dokonce předpovídat a modelovat jejich mechanismy.

Pro popis struktury a reaktivity molekul se často využívá vibrační, tedy infračervená (IR) nebo Ramanova spektroskopie, která vypovídá o uspořádání vazeb v molekule a o pohybech atomů. Zde se omezíme na příklady interpretace infračervených spekter, jejichž aplikaci ukážeme na modelu jednoduché reakce.

4. Bylo pozorováno, že v prostředí silné kyseliny, volme HI, dochází k přeměně mezi fenolem a anisolem (fenylmethyletherem). Navrhněte, jaká z těchto sloučenin je reaktantem a jaká produktem reakce. Zapište přeměnu chemickou rovnicí.

Předcházející otázku je možné vyřešit s využitím chemické intuice nebo porovnáním s typovými reakcemi uváděnými v běžných učebnicích organické chemie. Ne vždy se to však může podařit, a právě v takových případech se ukáže síla spektroskopických experimentů. Ukažme si, jak bychom je využili pro popis uvažované reakce, kdybychom o ní nic nevěděli.

Absorpční infračervené spektrum se pořizuje tak, že vzorek (organické či jiné sloučeniny) ozáříme krátkým pulsem spojitého IR záření pokrývajícím celou škálu jeho frekvencí. Po průchodu vzorkem jej zachytíme detektorem a matematicky rozložíme na jednotlivé vlnové délky, frekvence nebo vlnočty. Pokles intenzity na konkrétních vlnočtech ukazuje na absorpci záření molekulami vzorku. Ta má za následek zesílení konkrétního vazebného pohybu, jehož energie je shodná s energií pohlceného fotonu. Kompletní interpretace experimentálního spektra je složitá, můžeme si však pomoci tabulkou typických vibračních vlnočtů různých vazeb.

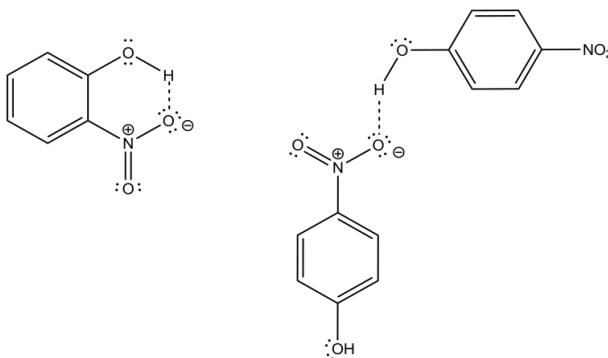
Tabulku P1 potřebnou pro řešení navazujících příkladů naleznete v přílohách¹². Zvláštní postavení v ní má takzvaná oblast otisku prstu, interval vlnočtů, na kterých absorbují typicky nízkenergetické vibrace. Jejich charakter závisí na vazebné geometrii a rozložení energie v každé konkrétní molekule, a vibrace typické pro

¹²https://drive.google.com/drive/folders/18Pq3I-ePvOYJzosO3x0a6_xavaEa99NY?usp=sharing

jednotlivé funkční skupiny v něm tedy lze rozlišit jen velmi obtížně. Velmi silnou vlastností otisku prstu je ale to, že jeho průběh je jedinečný pro každou molekulu, a lze jej tedy využít k jejímu ztotožnění například vhodným počítačovým programem.

Vlnočty odpovídající vibracím jednotlivých funkčních skupin ukázané v tabulce P1 jsou na rozdíl od otisku prstu stanoveny průměrováním měření více vzorků různých molekul. Polohu pozorované absorpce tedy není možné ztotožnit zcela přesně.

5. Na obrázku níže je schematicky znázorněna jedna z možných interakcí, které mají vliv na energii (vlnočty) O—H vazby v molekulách fenolů. O jakou interakci jde? Jak se mezi *o*-nitrofenolem a *p*-nitrofenolem liší?



Obrázek 1: Strukturní elektronové vzorce *o*- a *p*-nitrofenolu se znázorněním zkoumané nevazebné interakce

6. Očekáváte, že naznačená interakce vazbu O—H spíše zeslabí (prodlouží), nebo nechá posílit (zkrátit)? Jaký vliv bude tato skutečnost mít na vibrační vlnočty vazby?

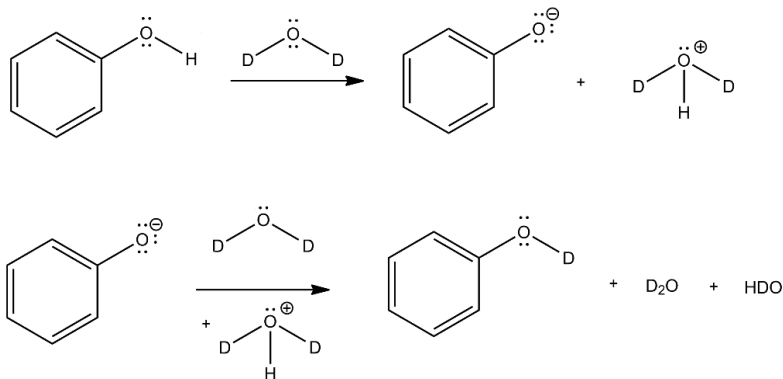
Obdobně mohou některé funkční skupiny interagovat například s polárním rozpouštědlem, což je i případ fenolové skupiny. Při tom je podstatné si uvědomit, jak ochotně může k těmto interakcím docházet. V případě fenolu si můžeme pomoci jeho acidobazickými vlastnostmi.

7. Nesubstituovaný fenol je podle běžných měřítek slabá kyselina. Navázáním výše znázorněných nitroskupin však jeho kyselost řádově vzroste. Proč tomu tak je? Jaké jiné skupiny (navázané v *ortho* nebo *para* poloze) mohou mít podobný vliv?

Mezním případem interakce s rozpouštědlem je výměna atomů vodíku, jak si můžeme ukázat na reakci fenolu s těžkou vodou (D_2O). Energie, a tedy i vibrační

vločet vazby O—D ve vzniklém fenolu-d¹ je pak zásadně odlišná od výchozího nedeuterovaného fenolu.

8. Doplněte mechanismus diskutované isotopové výměny správným zakreslením zahnutých šipek, kterými na vhodných místech znázorníte pohyb elektronových párů aromatické molekuly a reaktantů *nad* reakčními šipkami.



Obrázek 2: Mechanismus výměny vodíku mezi fenolem a těžkou vodou

Pokud se podobné vlivy uplatňují ve větší míře, může být výhodné interpretovat spektra reakčních směsí pomocí počítačových programů nebo chemických modelů. Zdaleka ne vždy je však podobný postup nutný. Chemickou intuici je naopak vhodné použít kdykoliv!

Vraťme se k reakci popsané v otázce 4. Předpokládejme, že se při jejím sledování podařilo získat spektra aromatického reaktantu a přečištěného produktu tak, jak je ukazují obrázky P1-A a P1-B v přílohách úlohy.

9. Na základě údajů na obrázcích a v tabulce P1 rozhodněte a zdůvodněte, zda jsou anisol, respektive fenol reaktantem nebo produktem jejich vzájemné přeměny v prostředí HI. Je Váš závěr v souladu s navrženým řešením otázky 4?

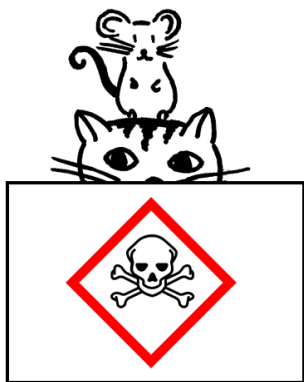
Nyní nám už zbývá pouze napsat na papír onen reakční mechanismus. Pokud bychom ke sledování uvažované přeměny využili časově rozlišenou spektroskopii, zjistili bychom, že probíhá ve dvou krocích. V prvním z nich vzniká klíčový meziprodukt; jde o kladně nabitý ion s nábojem lokalizovaným na atomu kyslíku.

10. Pokuste se navrhnout strukturu meziproduktu a mechanismus celé přeměny.

Úloha č. 5: O kočkách a myších

(12 bodů)

Autor: Karolína Fárníková



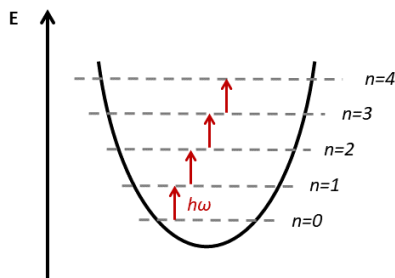
„Myslím tím, co na světě je takové, aby stálo za to žít?“

KOČKY, KOČKY JSOU MOC MILÁ STVOŘENÍ.

Citát: Magický prazdroj, Terry Pratchett

Kočky jsou záhadná stvoření. V jednu chvíli je nemůžete najít ani v nejtemnějších koutech svého bytu, ale jakmile se ozve sypaní granulí, už se vám motají kolem nohou. Jindy je zase najdete smotané do klubíčka v krabici od bot, ale v noci si přivlastní tři čtvrtiny vašeho polštáře. Jejich chování je často podobnější kvantovým částicím než makroskopickým objektům. A tomu se budeme věnovat v první části této úlohy.

Když je kočka v naprostém klidu, tak obvykle spí a přitom přede. Podobně když máme molekuly „v klidu“, tak i v základním stavu stále kmitají, a mají tudíž nějakou energii, která se označuje jako energie základního vibračního stavu (*zero-point vibrational energy*, ZPVE). Vibrační stavy se dají aproximovat modelem harmonického oscilátoru (1, obr. 1). E_n je energie stavu o kvantovém čísle n , které nabývá hodnot přirozených čísel a nuly, $\hbar$ je redukovaná Planckova konstanta a ω je úhlová frekvence.



Obr. 1: Model harmonického oscilátoru. Na ose y je energie hladin E o kvantovém čísle n .

1. Pokud frekvence předení je 70 Hz, jaká bude ZPVE kočky?

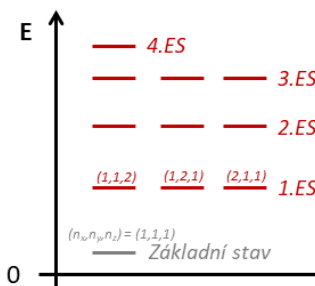
$$(1) \quad E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Kromě energie různých stavů jsme schopni pomocí harmonického oscilátoru spočítat silovou konstantu vazby k (2), kde se navíc vyskytuje i redukovaná hmotnost μ .

2. Představme si, že kočka ulovila myš, a vznikla tak „molekula“ kočka–myš. Předání kočky má frekvenci 70 Hz a přenese se i na tu myš, takže můžeme říct, že se celá naše molekula kmitá s frekvencí 70 Hz. Jaká je tedy silová konstanta mezi kočkou a myší? Pokud by tato silová konstanta zůstala stejná pro „molekulu“ myš–myš, jaká by pak byla frekvence kmitání této molekuly? Co můžete z vypočtených usoudit o frekvenci kmitání reálných molekul? Pro výpočet redukované hmotnosti počítejte s hmotností kočky 5 kg a hmotností myši 20 g.

$$(2) \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Kočky se často nachází v krabicích, a pokud je chceme z nich dostat, musíme vynaložit určitou energii. Například když posvítíme laserovým ukazovátkem, můžeme zaujmout kočku natolik, aby vyskočila z krabice. Toto chování můžeme přirovnat modelu částice (např. elektronu) v krabici (3, obr. 2), kdy jsme schopni fotonem excitovat částici na vyšší energetické hladiny. V rovnici (3) je E_i energie i -tého stavu, h je Planckova konstanta, L je hrana krabice, m_e je hmotnost elektronu a n_x , n_y a n_z jsou kvantová čísla. Jejich hodnoty nabývají hodnot přirozených čísel (kromě nuly) a součet jejich kvadrátů vypovídá o tom, jak vysoko je stav položený. Zároveň se může stát, že např. $n_x = n_z$ nebo že se rovnají všechna kvantová čísla.

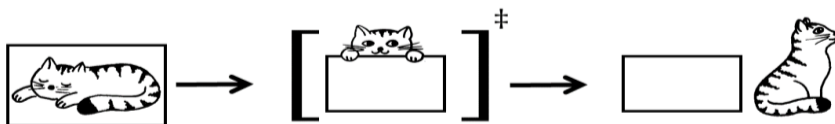


Obr. 2: Model částice v krabici. Na ose y je energie hladin o kombinaci kvantových čísel n_x , n_y a n_z . Jejich hodnoty pro základní stav a první excitovaný stav jsou doplněné v obrázku.

3. Předpokládejme, že kočka je částice o hmotnosti elektronu a leží v krychlové krabici o hraně 12,44 Å. Laserem o jaké barvě bychom museli posvítit na kočku, aby se excitovala do třetího excitovaného stavu?

$$(3) \quad E_i = \frac{h^2}{8L^2m_e} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Kromě světla můžeme vylákat kočku z krabice i pomocí večere. Ta ale musí být dostatečně lákavá, aby kočka byla ochotná překonat aktivační bariéru krabice a došla až k misce. Reakce by tedy mohla probíhat následovně:



V prvním kroku máme kočku v klidu a v krabici, ale vůně masa jí dodá dostatečnou energii, a začne tak vylézat z krabice, což můžeme popsat jako tranzitní stav. Výsledným produktem je kočka mimo krabici.

4. Pokud víme, že se zvýšením teploty o 5 °C se nám zvýší rychlostní konstanta 1,5× a že aktivační energie je v rozmezí 20 až 25 °C konstantní, kolik gramů syrového hovězího masa by bylo potřeba, aby 1 mol kočky překonal aktivační bariéru? Pro výpočet využijte Arrheniovu rovnici (4). Při vyhledání energetické hodnoty masa uveďte zdroj.

$$(4) \quad k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

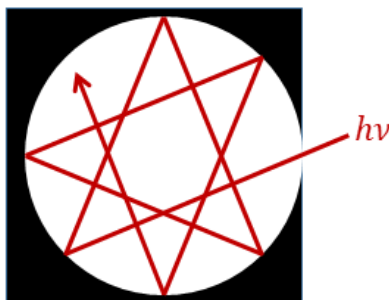
Jak asi každý majitel potvrdí, kočka prospí většinu dne a probírá se zásadně ve tři hodiny ráno, aby vám přinesla do postele čerstvě ulovenou myš. Aby ji ale mohla ulovit, musí být splněno několik podmínek: kočka musí na myš narazit (srážková podmínka) a musí mít dostatečnou chuť a energii na lov (energetická podmínka). Tyto podmínky jsme schopni aplikovat na srážkovou teorii (5), která nám obecně umožňuje spočítat rychlostní konstantu pro reakci dvou molekul v plynné fázi. My ji zde aplikujeme na reakci, kde setkáním myši a kočky vznikne ulovená myš a spokojená kočka.

Pro výpočet potřebujeme znát objem a hmotnost kočky a myši a aktivační energii reakce. Objemy nám ovlivní srážkovou podmínku, která je ve vzorci vyjádřena účinným průřezem σ_{AB} . Ten můžeme popsat jako obsah kruhu, jehož poloměr je součtem poloměru obou reaktantů (v našem případě kočky a myši). Hmotnosti využijeme k výpočtu redukované hmotnosti μ_{AB} , ze které spočítáme rychlost reaktantů pro energetickou podmínku $\sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu_{AB}}}$, a pro energetickou podmínku je ještě potřeba aktivační energie E_a .

5. Předpokládejme, že jak myš, tak i kočka jsou pořádně vykrmené, takže je můžeme aproximovat na kuličky. Průměr myši o hmotnosti 20 g je 7 cm a průměr kočky o hmotnosti 5 kg je 3,5 dm. Když aktivací energie reakce je $11,95 \text{ kcal mol}^{-1}$, jaká je její rychlostní konstanta? Předpokládejte teplotu 10°C .

$$(5) \quad k = N_A \sigma_{AB} \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu_{AB}}} e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

V posledním příkladu se podíváme specificky na černé kočky, kolem kterých se točí mnoho pověr. Tou nejčastější je, že když vám černá kočka přejde přes cestu, tak vás čeká nějaké neštěstí. Bohužel tyto pomluvy mohou vést i k tomu, že černé kočky jsou méně často adoptované z útulků. No a právě v tomto příkladu si dokážeme, že černá kočka může ve vašem domově vyvolat ne nepříjemnou, ale naopak velmi milou a hřejivou atmosféru jak svým chováním, tak i pohledem. A jak hřejivou, to si dokážeme pomocí modelu dokonale černého tělesa (obr. 3).



Obr. 3: Model dokonale černého tělesa znázorněného jako úzký otvor v krabici.

6. Dokonale černé těleso se dá popsat jako úzký otvor v krabici, kterým se dovnitř dostane světlo, ale už se nedostane ven. Místo toho se paprsek začne odrážet uvnitř krabice, a tím ji předá energii, kterou následně vyzáří samotná krabice. Když se podíváme na kočku, specificky na její oči, tak vidíme, že jsou tvořeny úzkou černou panenkou a zelenožlutou duhovkou. Jakou by tedy kočičí oči měly teplotu, pokud bychom duhovku aproximovali dokonale černým tělesem? Pro výpočet použijte Wienův posunovací zákon.

Řešení úloh 1. série 21. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Na rozezhřátí

(6 bodů)

Autorka: Zuzka Hybnerová

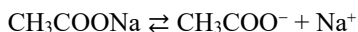
1. V polštářku je roztok octanu sodného.
2. Teplo se uvolňuje při krystalizaci přesyceného roztoku octanu. Jde vlastně o teplo přijaté a uložené při rozpouštění.
3. Přesycený roztok není dlouhodobě stabilní, ale sám od sebe v tomto případě nekrytalizuje. Potřebuje impuls pro začátek krystalizace – nějaké krystalizační jádro, a tím je částice (drobná částice kovu nebo mikroskopický krystal octanu) uvolněná při ohnutí plíšku.
4. a) Abychom opět umožnili celému množství obsažené soli se rozpustit.
b) Souvisí s to s rozpustností.
c) Trend je takový, že s teplotou roste rozpustnost.
5. $S = 45 \text{ g}/100 \text{ ml H}_2\text{O}$

$$M = 82 \text{ g/mol}$$

$$c = \frac{n}{V}$$

$$n = \frac{m}{M}$$

$$c = \frac{m}{MV} = 5,488 \text{ M}$$



$$K = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-][\text{Na}^+]}{[\text{CH}_3\text{COONa}]}$$

$$K_s [\text{CH}_3\text{COO}^-][\text{Na}^+]/[\text{CH}_3\text{COO}^-] = [\text{Na}^+] = c$$

$$K_s = c^2 = \left(\frac{m}{MV}\right)^2 = 30,118$$

6. $\Delta H = 19,7 \text{ kJ/mol}$

$$V = 0,2 \text{ l}$$

$$n = 115 \% n(\text{sat})$$

$$Q = \Delta H \cdot n$$

$$c_{\text{sat}} = \frac{m}{MV'} = 5,488 \text{ M}$$

$$n = c_{\text{sat}} \cdot V \cdot 1,15$$

$$Q = c_{\text{sat}} \cdot V \cdot 1,15 \cdot \Delta H = 24,866 \text{ kJ}$$

7. Půjde o zásaditý roztok, neboť octan sodný je sůl silné zásady a slabé kyseliny.

8. $c = 5,488 \text{ M}$

$$K_a = 1,75 \cdot 10^{-5}$$

$$K_b = \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}][\text{OH}^-]}{[\text{CH}_3\text{COO}^-]} \approx \frac{[\text{OH}^-]^2}{c_{\text{sat}} - [\text{OH}^-]} = \frac{K_w}{K_a}$$

$$\text{pOH} = -\log(\text{OH}^-) = 4,252$$

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 9,748$$

9. Použil by nejspíš kuchyňský ocet (8% roztok kys. octové) a „krtka“ na odpady (téměř čistý granulovaný NaOH) nebo jedlou/prací sodu ($\text{NaHCO}_3/\text{Na}_2\text{CO}_3$).

10. Jde o med.

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

Úloha č. 2: Ze života plastu

(9 bodů)

Autorka: Karolína Gálová

1. *Poly* – „mnoho, víc“

Mono – „jeden“

Mer – základní konstituční jednotka

Polymer = mnoho monomerů spojených do dlouhého řetězce

Monomer = základní, nejjednodušší stavební jednotka polymerů

2. *Biopolymer* – kyselina hyaluronová, škrob, polyaktát, DNA, celulóza, glycin, kasein, kolagen

Bioplasty – polyaktát

Syntetické polymery – polyethyltereftalát, epoxidová pryskyřice, molitan, teflon, polystyren, polyethylen

Nejde o polymery – želatina, sacharóza, dural, řepkový olej, sfingosin

3. *Galalit* – suroviny pro výrobu jsou kasein a formaldehyd. Vyrábí se polymerační reakcí dvou proteinových řetězců s formaldehydem, při které dochází k jejich zesíťování methylenovým můstkem.

Celuloid – suroviny pro výrobu jsou kafr a nitrocelulóza. Vyrábí se esterifikací alkoholových skupin polysacharidu celulózy na nitrocelulózu pomocí kyseliny dusičné. Do reakce se také přidává kyselina sírová, která působí jako katalyzátor; následně dochází k promývání a vyplavení volných kyselin. Po sušení se přidá alkoholický roztok kafru, který složitější kopolymerací způsobí změnu makromolekulární struktury nitrocelulózy na homogenní gel.

Oba plasty byly v minulém století hojně vyráběny jakožto náhražky drahé slonoviny, ebenového dřeva, rohoviny a dalších materiálů. Galalit se přestal vyrábět především kvůli netvarovatelnosti, ale také kvůli velké spotřebě mléka, ze kterého se izoloval kasein. Celuloid byl hojně využíván ve filmařském průmyslu, ovšem velkou nevýhodou byla hořlavost i bez přístupu vzduchu, proto byl nahrazen výrobou acetátu celulózy dohromady s polyesterem.

4. Bakelit, poprvé vyroben v roce 1907. Typickými výrobky z bakelitu byly například telefonní pevná linka, hodiny, vysavače, toaletní prkénko...
5. Bakelit byl ve své době velmi oblíbený vzhledem k poměrně jednoduché výrobě, tvarovatelnosti, ohnivzdornosti (na rozdíl od dřeva) a pevnosti (není tak křehký jako sklo). Další obrovskou výhodou bylo využití fenolu, odpadního produktu destilace kamenného uhlí. Dnes již tak významný není, jelikož se na

trh uvedla spousta vzhledově hezčích plastů jednodušších na průmyslovou výrobu.

6. Hlavním rozdílem ve výrobě termoplastů a reaktoplastů je (ne)zařazení procesu vulkanizace, který se provádí při výrobě reaktoplastů. Jde o vytvrzování pomocí UV záření, katalyzátorů v podobě kyselin a zásad nebo síry (vulkanizace), které způsobuje, že reaktoplasty mají odlišné vlastnosti oproti termoplastům (viz otázka č. 8).

7. *Termoplasty* – polyethylen, polyvinylchlorid, polymethylmethakrylát, polypropylen

Reaktoplasty – epoxidová pryskyřice (EP), polyesterová pryskyřice (UP), fenol-formaldehydová pryskyřice (PF)

8. *Reaktoplasty* jsou po zahřátí tvarovatelné jen po dobu, než dojde ke zchlazení na původní teplotu. Při jejich zahřátí totiž dochází k chemickým reakcím a zesíťování, díky kterým už jejich strukturu nelze dále měnit.

Termoplasty při zahřívání změknou a je možné je ohýbat i tvarovat, poté se opět ochladí a jsou v pevném stavu. Tento proces lze několikrát opakovat, jelikož jejich chemická struktura se nemění.

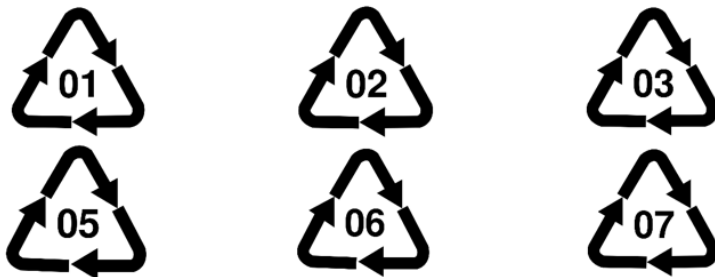
9. a) *Sibiř*: na tomto místě by nebylo vhodné postavit chemickou továrnu, jelikož je zde trvale velká zima. Přivést do těchto míst vodu do chladičů by tudíž bylo velice náročné, případně i nemožné. Dalším negativem je zmrzlá půda, na které by se továrna těžko stavěla. Pozitivem je naopak nízké až nulové osídlení, jelikož by tak továrna alespoň nezasahovala do okolní urbanizace, přičemž na druhou stranu je zde nevhodná dostupnost pro pracovníky.

b) *Egypt*: toto místo je již vhodnější než první, ovšem přívod vody by zde také nebyl úplně snadný. Teoreticky by bylo možné přivádět vodu ze Středozemního moře, tu by ale bylo nutné odsolovat pomocí dalšího finančně nákladného zařízení. Dovoz surovin by naproti tomu takový problém nebyl, jelikož by se daly dopravovat například z nedaleké Saúdské Arábie.

c) *Česká republika*: jde o velice výhodné místo s dostatečným přívodem vody do chladičů, dostupnými vstupními surovinami (prostřednictvím plynodů, ropodů...) a poměrně stálým podnebím bez velkých teplotních výkyvů. Mimo to jde o strategické místo pro rozvoz konečných výrobků do celé Evropy.

10. Reaktoplasty nelze téměř vůbec recyklovat kvůli velice pevným chemickým vazbám, které vznikají vytvrzováním.

11. Jde o recyklační symboly; najdeme je na jakémkoliv plastu.



Obrázek 1: Recyklační symboly: 01 – PET – polyethylentereftalát, 02 – PE – HD – vysokohustotní polyethylen, 03 – PVC – polyvinylchlorid, 05 – PP – polypropylen, 06 – PS – polystyren, 07 – O – ostatní plasty (polyamidy, polykarbonáty, bioplasty)

Otázka 1 – 0,25 bodu, 2 – 2 body, 3 – 1 bod, 4 – 0,5 bodu, 5 – 1 bod, 6 – 0,5 bodu, 7 – 0,7 bodu, 8 – 0,6 bodu, 9 – 1,8 bodu, 10 – 0,4 bodu, 11 – 0,25 bodu. Celkem 9 bodů.

Úloha č. 3: Krystalizační

(7 bodů)

Autorka: Simona Kožnarová

1. a) $R(20\text{ }^{\circ}\text{C}) = 35,86\text{ g}/100\text{ g vody}$. Uznány budou hodnoty $34 - 37\text{ g}/100\text{ g}$.
 b) Body jsou přičteny za doručené foto 😊.
 c) Body jsou přičteny za jakoukoli správnou odpověď. Kromě kuchyňské soli například: cukr, jedlá a prací soda, kyselina citronová, modrá skalice (bazénová chemie), erythritol.

2. Výpočet:

$98,1\text{ g Al}_2(\text{SO}_4)_3$ ve $198,1\text{ g}$ nasyceného roztoku ($100\text{ }^{\circ}\text{C}$)

$x\text{ g Al}_2(\text{SO}_4)_3$ ve $250,0\text{ g}$ nasyceného roztoku ($100\text{ }^{\circ}\text{C}$)

$$x = \frac{98,1 \cdot 250}{198,1} = 123,8\text{ g rozpuštěného Al}_2(\text{SO}_4)_3 \text{ při } 100\text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$m_{\text{vody v roztoku}} = 250,0 - 123,8 = 126,2\text{ g}$$

$36,4\text{ g Al}_2(\text{SO}_4)_3$ ve 100 g vody ($20\text{ }^{\circ}\text{C}$)

$x\text{ g Al}_2(\text{SO}_4)_3$ ve $126,2\text{ g vody}$ ($20\text{ }^{\circ}\text{C}$)

$$x = \frac{36,4 \cdot 126,2}{100} = 45,9\text{ g rozpuštěného Al}_2(\text{SO}_4)_3 \text{ při } 20\text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$m_{\text{vykrystalizovaného síranu}} = 123,8 - 45,9 = 77,9\text{ g}$$

3. $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cu}_2\text{SO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, K_2CrO_4 , jakákoli další látka rozpustná ve vodě, ale nerozpustná v ethanolu.
4. Srážecí reakce: využívají se pro skupinová stanovení iontů, srážecí titrace a gravimetrii.
5. Frakční krystalizace slouží k oddělení dvou či více látek na základě jejich rozdílné rozpustnosti v jednom či ve směsi rozpouštědel. Provést frakční krystalizaci lze odpařováním rozpouštědla, ochlazováním i srážením (změnou rozpouštědla).
6. Kádinky, technická sůl, gumová palička (příprava ledové drtě), výrobek ledu, teploměr.
7. Vyvolání krystalizace přidáním krystalu látky do roztoku.
8. Emulze, suspenze, koloidní roztok

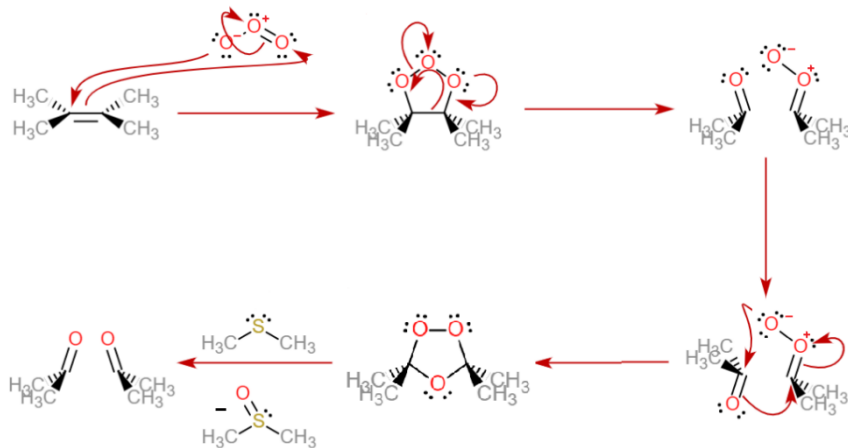
Otázka 1 – 1,5 bodu, 2 – 1,25 bodu, 3 – 0,75 bodu, 4 – 0,75 bodu, 5 – 1 bod, 6 – 0,5 bodu, 7 – 0,5 bodu, 8 – 0,75 bodu. Celkem 7 bodů.

Úloha č. 4: Ozonolýza

(13 bodů)

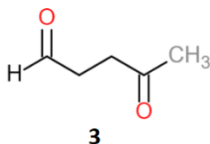
Autor: Jakub Krieger

1.



Obrázek 1: Doplněné schéma ozonolýzy 2,3-dimethylbut-2-enu

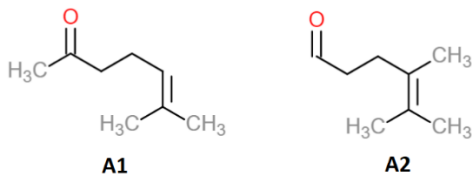
2. a)



Obrázek 3: Aldehyd levulový

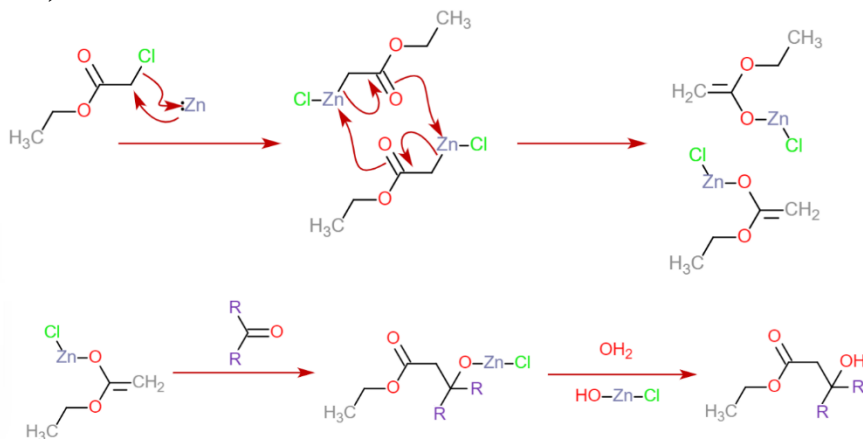
3. a) Nekonečně mnoho. Látka **A** by totiž mohla být polymer, například gutaperča.

b) Dvě, podle toho, jestli aceton napojíme na ketoskupinu (**A1**) nebo aldehydovou skupinu (**A2**) (viz obrázek 4).



Obrázek 4: Možné struktury látky **A**

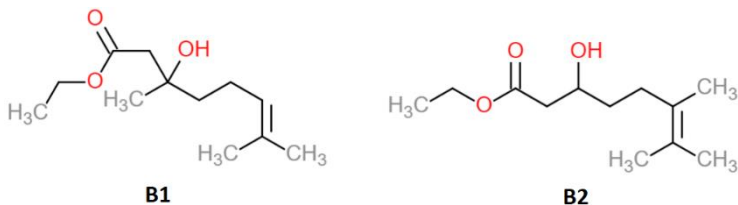
- c) Struktura **A** má jednu karbonylovou skupinu.
4. a) Příprava Reformatského činidla je na Obrázku 5 spolu se schématem Reformatského reakce.
- b)



Obrázek 5: Schéma Reformatského reakce chloroctanu ethylnatého se zinkem a obecným ketonem. **R** označuje obecný uhlovodíkový zbytek

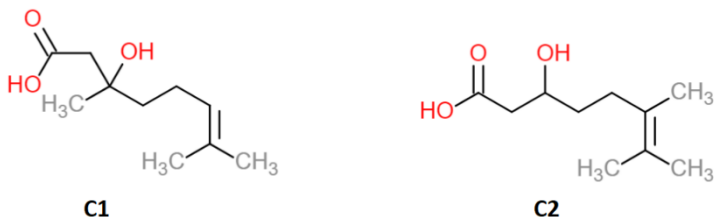
Za správné řešení úlohy 4a) bude považován jak Reformatského enolát, tak jeho prekurzor.

- c) Při Reformatského reakci nedochází k nukleofilním adicím na esterové skupiny, zatímco při Grignardově reakci ano. Grignardovo činidlo obsahující esterovou skupinu nelze připravit, jelikož by dvě molekuly Grignardova činidla zreagovaly mezi sebou.
- 5.



Obrázek 6: Možné struktury látky **B**

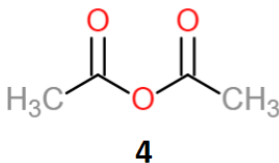
6. a) Substrátem je ester. Působením hydroxidu vzniká karboxylát a alkohol.
b)



Obrázek 7: Možné struktury látky C

Vzhledem k otázce 6a) byla uznávána též forma karboxylátu.

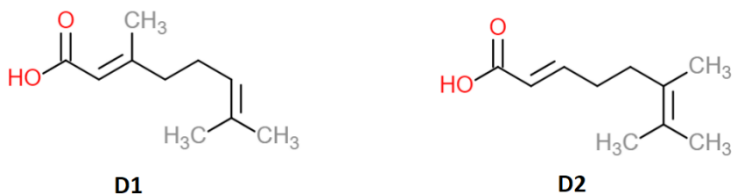
7. a)



Obrázek 8: anhydrid octový (dnešním názvoslovím anhydrid kyseliny octové, nebo acetanhydrid)

- b) Nejvýhodnější bude ta možnost, kdy je dvojná vazba v konjugaci s karbonylovou skupinou, kvůli stabilizaci rezonancí.

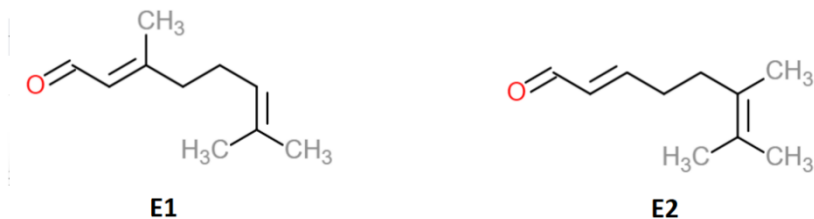
- c)



Obrázek 9: Možné struktury látky D

Vzhledem k otázce 6a) byla uznávána též forma karboxylátu.

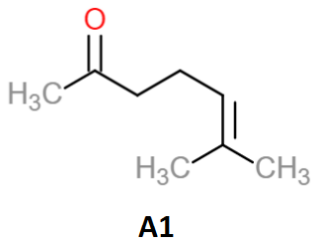
8.



Obrázek 10: Možné struktury látky E

9. Struktura **E1** – citral. Je to terpenoid, používá se jako aromatická složka parfémů.

10.



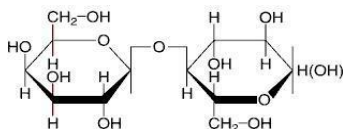
Obrázek 11: Struktura látky A

Otázka 1 – 0,5 bodu, 2 – 0,5 bodu, 3 – 2 body, 4 – 2,25 bodu, 5 – 1 bod, 6 – 1,75 bodu, 7 – 2,5 bodu, 8 – 1 bod, 9 – 1 bod, 10 – 0,5 bodu. Celkem 13 bodů.

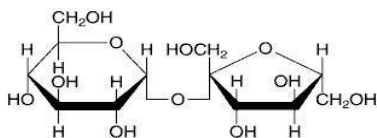
Úloha č. 5: Mléko v prášku**(13 bodů)**

Autorky: Lenka Bartoň, Lada Švecová

1. Laktosa je disacharid tvořený jednou molekulou galaktosy a jednou molekulou glukosy. Sacharosa je disacharid tvořený jednou molekulou fruktosy a jednou molekulou glukosy. Sladivost laktosy je cca 40% ve srovnání se sacharózou.



laktosa (Glu-Gal)



sacharóza (Glu-Fru)

2. a) Lidské 7 g/100 ml, kravské 5 g/100 ml.
 b) Bylo by třeba přidat 2 g laktosy. Jelikož 1 g laktosy je sladký jako 0,4 g sacharosy, je třeba přidat 0,8 g sacharosy.
 c) Energetická hodnota základních živin ve 100 ml mléka:
 bílkoviny – 4 kcal/g, sacharidy – 7 kcal/g, tuky - 4 kcal/g
 složení MM: bílkoviny 1 g, sacharidy 7 g, tuky 4 g.

Energetická hodnota: $1 \cdot 4 + 7 \cdot 4 + 4 \cdot 9 = \mathbf{68 \text{ kcal}}$

složení KM: bílkoviny 3 g, sacharidy 5 g, tuky 1,5 g.

Energetická hodnota: $3 \cdot 4 + 5 \cdot 4 + 1,5 \cdot 9 = \mathbf{45,5 \text{ kcal}}$

složení upraveného KM: bílkoviny 3 g, sacharidy 5,8 g, tuky 1,5 g.

Energetická hodnota: $3 \cdot 4 + 5,8 \cdot 4 + 1,5 \cdot 9 = \mathbf{48,7 \text{ kcal}}$

Upravené polotučné kravské mléko má nižší energetickou hodnotu než mléko mateřské, ale vyšší než neupravené polotučné kravské mléko.

Tabulka 1: Složení kravského a lidského mateřského mléka / 100 ml

	Bílkoviny: 4 kcal/g	Sacharidy: 7 kcal/g	Tuky: 4 kcal/g
Kravské mléko	3 g	5 g	1,5 g
Mateřské mléko	1 g	7 g	4 g

68 kcal 100 %

48,7 kcal x %

$$x = (48,7 \cdot 100 \%) \div 68 = 71,62 \%$$

- d) Energetická hodnota poskytovaná upraveným polotučným kravským mlékem odpovídá 71,62 % energetické hodnoty poskytované stejným množstvím lidského mateřského mléka.
3. a) Produkt D je 2-fukosyllaktosa.
b) Bakterie *Escherichiae coli*.
c) Látka A je glycerol, látka B fukosa a látka C laktosa.
d) Chrání střevní epitel před patogenními mikroorganismy. Podporují růst žádoucí mikroflóry jakožto tzv. prebiotika.
4. a) kravské – β -laktoglobulin
lidské – lipáza
obě – cholesterol, lysozym, IgA, IgG, laktoferrin (v kravském jen stopy)
b) více v kravském – IgG
více v lidském mateřském – cholesterol, lysozym, IgA
c) lipáza – usnadňuje trávení tuku (pankreatická lipáza ještě není u kojenců zcela funkční), laktoferrin – váže železo.

Poznámka na okraj: IgG a IgG jsou takzvané imunoglobuliny; tyto bílkoviny (protilátky) jsou vytvořeny bílými krvinkami a zprostředkovávají jeden typ specifické imunitní odpovědi. Lidské Ig a kravské Ig jsou tedy odlišné a navzájem nezaměnitelné. Lidskému kojenci krávkové Ig s imunitní odpovědí nepomohou.

5. V lidském mateřském mléce je méně bílkovin než v kravském. Jejich množství je dostatečné, ale ne příliš vysoké, takže nepředstavuje nadměrnou zátěž pro ledviny kojenců.
6. Palmový tuk obsahuje značné množství kyseliny palmitové, která je důležitou složkou mateřského mléka. V rostlinných olejích, jako je slunečnicový, se nevyskytuje.
7. Palmitová kyselina je v palmovém oleji vázaná na α uhlík glycerolu a je pankreatickou lipasou z glycerolu uvolněná (na rozdíl od palmitové kyseliny v pozici β , jak se většinou vyskytuje v mateřském mléce). Volná kyselina palmitová chelatuje vápenaté ionty a dochází k tvorbě nerozpustného komplexu (tzv. zmýdlnění). Palmitová kyselina ani vápník tedy nemohou být vstřebány a odchází nevyužity stolicí. Nedostatek vápníku negativně ovlivňuje růst kostí.

Physiological Impact of Palm Olein or Palm Oil in Infant Formulas: A Review of Clinical Evidence, doi: 10.3390/nu12123676

8. a) Kyselina arachidonová a dokosaheptaenová.
b) Klesá.
9. Vitaminy D a K. Vitamin D je dodáván denně v podobě kapek, vitamin K se podává 1–2× jednorázově po porodu.

10. a) **Galaktosémie:** porucha konverze galaktosy na glukosu. V důsledku toho dochází ke zvýšení koncentrace galaktosy (příp. dalších meziproductů) v séru a následně k poškození jater a ledvin.

Fenylketonurie: porucha metabolismu fenylalaninu, který se u zdravých jedinců přeměňuje na tyrosin. U nemocných vznikají meziproducty toxické především pro nervovou soustavu.

- b) **Fenylketonurie:** mléko bez obsahu fenylalaninu se musí vhodně kombinovat s mateřským mlékem nebo běžnou náhradní výživou tak, aby množství přijatého fenylalaninu přesně odpovídalo potřebě dítěte.

Galaktosémie: podávají se mléka se sníženým obsahem laktosy či bez ní (např. výživa na bázi sóji).

Alergie na kravskou bílkovinu: používá se hydrolyzovaná bílkovina nebo umělé mléko na bázi sóji.

11. Koží mléko. Je lépe stravitelné než kravské. Také obsahuje větší množství oligosacharidů a přispívá k lepšímu složení střevního mikrobiomu v porovnání s kravským. Jeho složení je ale stále příliš vzdálené mateřskému, bez úprav tedy není vhodné ho podávat kojencům jako výhradní zdroj výživy.

Compositional and functional characteristics of goat milk and relevance as a base for infant formula, doi.org/10.1111/1750-3841.15574a

12. Příklady odpovědí: nedostatečný obsah HMO, protilátek, dalších esenciálních faktorů, nenavázání vztahu mezi matkou a dítětem, nemožnost přizpůsobit složení potřebám dítěte a měnit ho dle potřeby, ekonomická náročnost.

Otázka 1 – 0,5 bodu, 2 – 2,75 bodu, 3 – 3 body, 4 – 1,75 bodu, 5 – 0,5 bodu, 6 – 0,5 bodu, 7 – 0,25 bodu, 8a – 0,75 bodu, 9 – 0,75 bodu, 10 – 1,25 bodu, 11 – 0,75 bodu, 12 – 0,25 bodu. Celkem 13 bodů.

Zajíček chemik

