



Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 21 (2022/2023)

Série 4

**Termín pro odeslání řešení 4. série:
17. 4. 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 PDF¹. 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.

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.

¹ Neposílejte naskenovaná řešení s výjimkou obrázků, text bývá špatně čitelný.

Výlet s KSICHTem

Pozor, pozor! Jarní výlet s KSICHTem se bude konat 28. až 30. dubna v Třebíči. Prosíme zájemce, aby se včas zaregistrovali na stránkách KSICHTu², a to co nejdříve, počet míst je omezen! Informace k výletu budeme na webu průběžně aktualizovat.

Anketa

Milé řešitelky, milí řešitelé, jsme rádi, že se účastníte KSICHTu. Snažíme se, aby vám řešení úloh nepřineslo jen pochvalu vyučujícího chemie, protože jste řešili úlohy zrovna z jeho předmětu, ale aby vám seminář přinášel co nejvíce znalostí, možností k zamyšlení a snad i trochu zábavy. Potřebujeme proto znát váš názor. Byli bychom velmi rádi, kdybyste si našli chvílku na zodpovězení několika otázek³. Předem vám děkujeme za pomoc a přejeme vám hodně úspěchů nejen při řešení KSICHTích úloh.

Závěrečné KSICHTí soustředění

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

² <https://ksicht.natur.cuni.cz/akce/6-jarni-vylet-s-ksichtem/>

³ Odkaz na anketu vám bude zaslán e-mailem.

Úvodníček

Milé KSICHTřačky, milí KSICHTřáci,

náš letošní ročník se chýlí ke konci! Než se nachýlí docela, čeká Vás kromě výletu a závěrečného soustředění závěrečná pětice úloh v naší čtvrté sérii.

První z nich bude jak jinak než multizánrová. Nabídně Vám možná první, a doufejme ne poslední možnost využít něco z *Virální* (bio)chemie, kterou Vás provází letošní seriál. Autor virálního seriálu však naneštěstí od minulé série prošel hned třemi virovými nákazami, a na závěrečný díl se proto s Vámi bude těšit v letošní páté brožurce. Při dalším listování stávající brožurkou ale zdaleka nekončí kulturně bohaté texty! Další úloha naopak nabízí kromě chemie a fyziky vhléd i do historie vědy, a ve všech těchto tématech je doslova *Raketová*. Na dalších stranách čeká na Vaši pozornost přístupný vhléd do nejen chemické kinetiky připravený v úloze s téměř revue názvem *Zdeněk a holky*. Pokud byste se podobně jako autor úvodníčku s obtížemi dohledávali tamní malé míry, tak trochu pod pultem Vám nabízíme heslo „druhy sklenic“. O poznání větší míry budete naopak potřebovat pro *Optimalizační řešení II*, kde budete mít příležitost vyzkoušet si unikátní a jinde ve světě nevídanou roli informovaného generálního ředitele chemické továrny. Mocný závěr letošních úloh je pak navzdory svému názvu vše, jen ne *Povrchní*; na tomto místě nezbyvá než popřát hodně štěstí, dobrých nápadů a trpělivosti nejen s geometrií.

Řešitelé posledních dvou ročníků střední školy by od nás kromě brožurky měli mít také k dispozici informace, jestli a jak mohou využít své KSICHTí body při přihlašování na chemické vysoké školy. Pokud v této věci jakkoliv váháte, neváhejte se na nás obrátit! Všichni řešitelé bez ohledu na ročník studia jsou samozřejmě kdykoliv vítáni obrátit se s dotazem na autory úloh nebo poprosit o obecnou podporu na e-mailu ksicht@natur.cuni.cz.

Úplným závěrem mi dovoluťe Vám všem pográtulovat k letošním skvělým výsledkům, a hlavně Vám poděkovat, že jste s námi zůstali celý školní rok! Pokud se nám, alespoň částečně, podařilo rozšířit Vaše chemické obzory, odměňte nás svou milou přítomností na výletech, soustředěních a případně jako nové posily do organizačního týmu. Pokud máte nápady na zlepšení, dejte je nám kdykoliv vědět, a o to spíš se k nám přidejte na akcích semináře!

Za všechny KSICHTy zdraví a přeje hezké jarní dny

Vojta Laitl

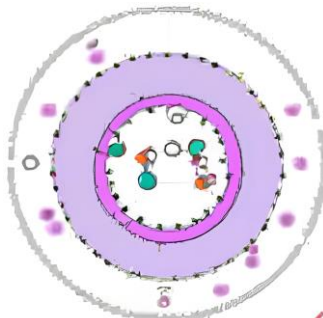
Zadání úloh 4. série 21. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Virální

(8 bodů)

Autor: Tomáš Heger

Letošní seriál se dobral svého závěru, ale znalosti v něm nabyté jistě chcete nějakým způsobem zúročit! Samozřejmě můžete své kamarády poučovat o koronavirech a jejich rozmanitostech, ale takoví odborníci se v posledních letech vyrojili úplně všude. Pojdme se raději podívat na úplně jinou třídu virů, která je zajímavá zejména (ale nejenom) pro vědce všeho druhu.



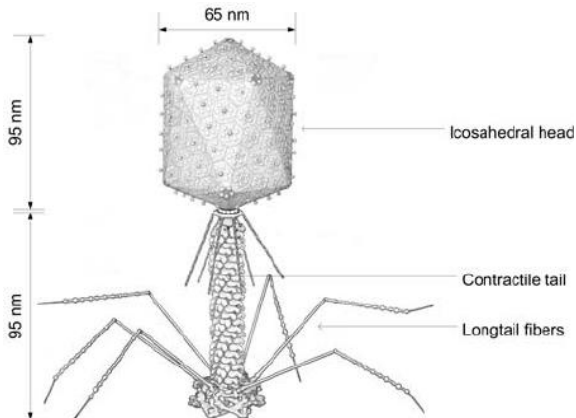
Obrázek vygenerovaný programem CrAllyon, zadané téma bylo Viral chemistry. Interpretace díla je ponechána jako cvičení pro čtenáře.

A o čem se tedy budeme bavit? Po dlouhých úvahách padla volba na bakteriofágy. Mluvíme tedy o virech, které napadají bakterie a využívají je ke svému vlastnímu množení! Zajímavé je, že jedním z nejlépe prozkoumaných virů vůbec je bakteriofág s poetickým jménem T4 (napadající velmi hojně se vyskytující bakterii *Escherichia coli*). Tento virus je považovaný za velmi dobrý modelový organismus. Díky tomu známe dobře mnoho vlastností T4, a to včetně jeho struktury.

1. a) Jaké vlastnosti jsou vyhledávané a žádané u modelového organismu? Uveďte alespoň tři další modelové organismy.
b) Z kolika různých proteinů celkem se skládá bakteriofág T4 dle UniProtu?

Jak vidno na obrázku 1, podobu viru známe naprosto přesně. Také nás ale zajímají určité detaily toho, jak se virová informace dostává dovnitř buňky.

2. a) Při napadení buňky T4 se virion nejdříve přichytí k buňce pomocí dlouhých bičíkových vláken, takzvaných *long tail fibres*. S jakými (makro)molekulárními jednotkami či látkami v plazmatické membráně *E. coli* tato vlákna interagují?
b) Některé bakterie se naučily viru T4 bránit, neboli získaly rezistenci. Experiment prokázal, že pro rezistenci vůči viru T4, bakterie *E. coli* musela prodělat dvě nezávislé mutace. Co by tyto mutace měly ovlivnit na podobě plazmatické membrány, aby bylo dosaženo účinné rezistence?



Obrázek 1: Schematická reprezentace T4 bakteriofágu

3. Virová DNA je následně do buňky vpravena pomocí stažitelného krčku (běžněji se setkáte s jeho anglickým jménem *contractile tail*). Jakým způsobem se T4 stažitelnému krčku daří proniknout skrze
 - a) plazmatickou membránu,
 - b) bakteriální buněčnou stěnu?
4. Když je stažitelný krček pěkně na svém místě, bakteriofág T4 odstraní „špunt“ a uvolní svou DNA do stažitelného krčku (někdy se mu říká také stažitelný bičík), skrze který se dostane do buňky. Jaká musí být vnitřní struktura stažitelného bičíku, aby co nejvíce usnadnila průchod DNA? Zaujímají nás především kvalitativní aspekty jako elektrostatika a rozměry stažitelného bičíku.

I proces virového průniku je tedy zmapován, a to už docela dlouho. Však také T4 byly extrémně důležitými organismy už od počátků molekulární biologie a genetického výzkumu. V té době byla genetika ještě v plenkách, a tak nebylo známo, zda jsou nositelem genetické informace proteiny nebo DNA. Právě experiment, jehož hlavní součástí byl bakteriofág, posloužil k důkazu toho, že genetickou informaci skutečně nese DNA.

5. Navrhněte proveditelný experiment, který prokazuje, že nositelem genetické informace je DNA a nikoliv proteiny.

Máme tedy svůj virus, který se rozmnožil v bakterii a může se dál šířit světem. Doteď jsme předpokládali, že to je náš požadovaný výsledek, ale co když tomu tak není? Zatímco pro viry napadající lidské hostitele máme přichystanou širokou řadu

antivirotik, u virů, které jsou zaměřené na bakterie, tomu tak úplně není. Proto je velké štěstí, že si bakterie ve spoustě případů dokáží poradit samy, a ještě virovou infekci náležitě zužitkují.

6. Co kdybychom chtěli přesto použít některá z lidských antivirotik na léčbu jedné nebohé bakterie *E. coli* napadené virem T4? Vyberte z následující nabídky antivirotik taková, která by mohla účinkovat, a zdůvodněte svoji volbu. molnupiravir, metiparaxon, foskarnet, entecavir, rimantadin, inosin pranobex
7. K čemu je bakteriím užitečné to, že jsou napadené bakteriofágy? Může bakterie *E. coli* tímto způsobem využít napadení virem T4? Předpokládejme, že jde o obyčejný T4 bez jakýchkoliv mutací.
8. V Česku se nedá dopustit na antivirotika vyvinutá profesorem Antonínem Holým, jako je například cidofovir. Ten by na bakteriofágy (asi?) nebyl příliš platný, zato však zachránil řadu lidských životů. Jaká nukleová báze a jaký derivát fosforečné kyseliny jsou nevhodnější k syntéze cidofoviru?

Podívali jsme se tedy na to, jak T4 virus vypadá, jak se šíří a jak se proti němu lze bránit. Dokonce jsme si i řekli, k čemu může být bakteriím užitečný. Nakonec i my jsme se naučili využít T4 ke svému prospěchu. Viry (a bakterie) mají spoustu zajímavých enzymů, bez kterých by molekulární biologie nebyla tam, kde nyní je. Z viru T4 je nejvíce používaná populární T4 DNA ligáza. Ta je schopna znovu „slepit“ kusy DNA, které jsme předtím „rozstříhali“ pomocí restriční endonukleázy.

9. Co musíme přidat do reakční směsi, aby T4 ligáza mohla správně fungovat?

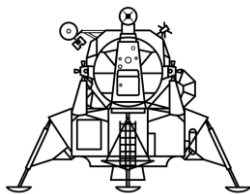
Na závěr seriálu si budete moci všimnout, že skutečně virálně se dnes šíří především informace a inovace (byť jistý nejmenovaný virus by mohl nesouhlasit). Jak si můžete přečíst v jeho posledním díle, ve svých dovednostech neskutečně rostou také různé AI systémy (*artificial intelligence*, systémy umělé inteligence). Viry a AI spolu vlastně mají mnoho podobného... nemají vlastní vůli či vědomí, řídí se pouze sadou předem daných předpisů, lidé se jich bojí a zároveň je využívají pro své vlastní záměry. Tak snad nějaké užití těchto virálních objektů najdete i vy!

10. Vygenerujte libovolné dílo pomocí nějakého AI softwaru (pro inspiraci CrAlyon či ChatGPT). Napište nám, jakou souvislost má toto dílo s tématem *virální chemie*.

Úloha č. 2 Raketová

(9 bodů)

Autor: Tomáš Albert Štefanov



Rok 2022 mnohým utkvel v pamäti najmä v súvislosti s konfliktom, ako prvý rok, kedy ste nepotrebovali rúško na nákup majonézy do šalátu či novými rekordami meškani na železnici. Avšak našlo sa aj pár vesmírnych jubileí. Bolo tomu už 45 rokov od štartu misii Voyager, 55 od prvého letu Apollo, či 50 odkedy Eugene Cernan priniesol od mesiaca Československú vlajku. Koncom roka sa okolo mesiaca preletela aj misia Artemis I a v blízkej dobe sa možno dočkáme aj návratu na nášho najbližšieho vesmírneho suseda.

V dobe, kedy prezident Kennedy oznámil plán vyslať človeka na mesiac, mali Spojené Štáty len 15 minút letovej skúsenosti a nikto poriadne nevedel, ako by mala vyzerat' vesmírna loď schopná takejto výpravy. V počiatku programu Apollo sa uvažovalo pristáť na mesiaci s veľkou, ťažkou raketou a odletieť z neho podobne ako zo zeme. Touto variantou sa zaoberala skupina pod vedením Wernhera von Brauna, avšak nedokázali prísť s uspokojivým riešením. S riešením prišiel napokon radový inžinier John Houbolt a to rozdelením lode na dve časti lunárny a veliteľský modul. Jeho návrh bol spočiatku prijímaný s veľkou kritikou, pretože nikto neveril, žeby bolo možné spojiť dve plavidlá na obežnej dráhe tak ďaleko od zeme. Postupom času sa ale ukazovalo, že to je patrne jediný spôsob ako takúto expedíciu uskutočniť. V roku 1962 jeho návrh podporil aj sám Wernher von Braun.

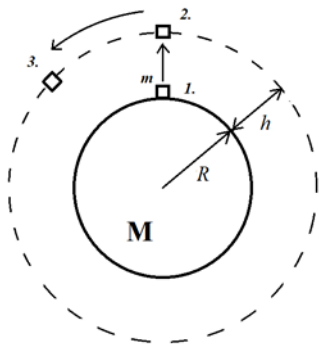
1. Ako sa volá materiál, v ktorom je obalená spodná časť lunárneho modulu a akú plní funkciu? Prečo je tento materiál zlatý?
2. Nakreslite reakciu prípravy polymérnej zložky tohoto materiálu.

Jedným z požiadavkov na vesmírnu loď je, aby zabezpečovala svojej posádke dýchateľnú atmosféru. Odpadné produkty dýchania sa môžu v stiesnených priestoroch stať relatívne rýchlo veľkým problémom. Na misiách Apollo sa na recykláciu vzduchu používali kazety naplnené hydroxidom lítnym, cez ktoré bol vzduch cirkulovaný a vychytával sa z neho CO_2 .

3. Koľko kilogramov LiOH je potreba na zachytenie všetkého CO_2 pri 12 dennej výprave pre trojčlennú posádku? Uvažujme že jediný CO_2 pochádza z dýchania a všetok sa viaže v kazetách na hydroxid. Priemerný počet nádychov za minútu je 16 a objem vydychovaného vzduchu je približne 500 ml. Obsah CO_2 vo vydychovanom vzduchu je rovnaký ako pri tlaku 14,7 PSI a teplote 68 °F a činí 5 % obj.

Hmotnosť bola najkritickejšia veličina pri celkovom projektovaní luárneho modulu. Firma Grummen, ktorá bola poverená jeho výrobou, dokonca vyplácala inžinierom prémie za každý gram hmotnosti, ktorý z neho dokážu odstrániť. Hmotnosť sa odzrkadlila aj na pohonnom systéme, kde sa pre návratový stupeň LM použil relatívne ľahký a jednoduchý motor na hypergolické pohonné látky; konkrétne Aerozin-50 a N_2O_4 . Malo to však aj odvrátenú stránku. Propelanty boli totiž natoľko korozívne, že sa takýto motor nedal použiť opakovane a prvý krát sa zažihol až naostro pri skutočnej misii, bez predošlej skúšky v továrni.

4. Vysvetlite pojem „hypergolické pohonné látky“ a uveďte aspoň 3 ďalšie príklady propelantov okrem vyššie spomenutých.
5. Napíšte vyčíslené rovnice pre reakcie jednotlivých zložiek Aerozinu-50 s N_2O_4 na plynné produkty.
6. Vypočítajte mernú entalpiu h_R° reakcie vzťahnutú na 1 kg reakčnej zmesi (palivo + okysličovadlo) pre hmotnostný pomer jednotlivých zložiek Aerozinu-50 1:1. Pozor na to, že stechiometrické koeficienty v celkovej rovnici nemusia byť celé čísla :). Štandardné zlučovacie entalpie pre jednotlivé látky pri 25 °C nájdete na konci úlohy v tabuľke č. 1



Obr.1 Jednoduchý model uvedenia telesa o hmotnosti m na obežnú dráhu

Keď poznáme mernú enthalpiu 1 kg reakčnej zmesi, poďme sa pozrieť na to, koľko jej budeme potrebovať na to, aby sme sa dostali na obežnú dráhu. V nasledujúcom texte budeme pod pojmom „palivo“ rozumieť reaktanty, a teda 1 kg paliva = 1 kg reakčnej zmesi v stechiometrickom pomere z úlohy č. 6.

Na obrázku č. 1 je nakreslený model vynesenia predmetu o hmotnosti m na obežnú dráhu vo výške h nad povrchom. M značí hmotnosť planéty a R jej polomer. Celkový dej možno rozdeliť na dve časti. Na vynesenie predmetu do výšky h (1. → 2.), pričom jeho rýchlosť v bode 1 aj 2 je nulová a práca je rovná zmene potenciálnej energie ΔE_p a na udelenie orbitálnej rýchlosti potrebnej na udržanie na obežnej dráhe (2. → 3.) čo je reprezentované zmenou kinetickej energie ΔE_k . Celková práca W_{tot} je daná súčtom týchto dvoch energií.

Energiu na túto prácu získavame v raketovom motore premenou tepelnej energie reakcie, ktorá sa dá vyjadriť ako súčin mernej entalpie reakcie a hmotnosti paliva m_p na ťah. Táto premena však nie je 100% a určite neprebíha pri teplotách

krásneho letného dňa. Z týchto dôvodov budeme uvažovať účinnosť premeny tepelnej energie na užitočnú prácu η .

Výsledná energia, ktorú možno získať z paliva, je potom daná rovnicou (1) ako:

$$E_R = -h_R^\circ m_p \eta \quad (1)$$

Posledný problém, pred ktorým stojí náš model, je fakt, že pri spaľovaní paliva sa mení celková hmotnosť vesmírnej lode m a stáli by sme pred relatívne zložitým matematickým problémom. Avšak z tejto nezávideniahodnej situácie nás dostane drobná aproximácia. Budeme uvažovať strednú hmotnosť vesmírnej lode, teda aritmetický priemer hmotností pri štarte a hmotnosti po vyhorení paliva na obežnej dráhe. Tímto sa nám práca potrebná na vynesenie vesmírnej lode na obežnú dráhu zredukuje na lineárnu rovnicu parametru m_p a môžeme jednoduchým bilancovaním energie dospieť k hmotnosti paliva.

Minimálne koľko kilogramov paliva potrebujeme, aby sme dostali na obežnú dráhu mesiaca horný stupeň lunárneho modulu s dvoma astronautami v skafandroch a 80 kg hornín. Obežná dráha leží 110 km nad povrchom mesiaca. Skafander váži 50 kg a astronaut 80 kg. Účinnosť premeny tepelnej energie reakcie je $\eta = 0,45$. Suchá hmotnosť stupňa činí 2200 kg.

7. a) Akou rýchlosťou sa musí lunárny modul pohybovať, aby sa udržal na uvedenej obežnej dráhe?
- b) Napíšte rovnicu strednej hmotnosti pre lunárny modul ako parameter m_p .
- c) Napíšte kinetickú a potenciálnu energiu ako parameter m_p a celkovú prácu ako súčet týchto energií (viz obrázok č. 1). Nezabúdajte na to, že sa pohybujeme v nehomogénnom gravitačnom poli.
- d) Vypočítajte hmotnosť paliva z bilancie celkovej práce a energie z paliva.

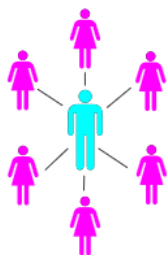
Tabuľka 1. Štandardné zlučovacie entalpie látok pri 25 °C

Látka	Zložka A ^{*(l)}	Zložka B ^{*(l)}	N ₂ O ₄ (l)	H ₂ O (g)	CO ₂ (g)
ΔH_f° [kJ/mol]	50,63	48,30	-19,56	-241,83	-393,52

Pozn. * M_A zložky A Aerozinu-50 < M_B zložky B!

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

Autorka: Karolína Zemene



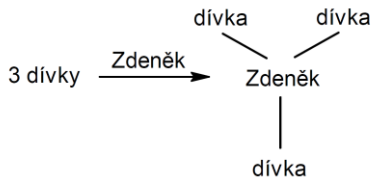
„...a Zdeňku, kolik jsi vlastně na tom táboře sbalil holek? Nás by to fakt zajímalo.“ „Dejte mi chvilku, musím to spočítat ... (5 minut ticha) ... jestli se počítá i líbání, tak asi kolem 20.“ „Hmm a schválně, řekni, kolik jich bylo nejvíc najednou?“ „Já tipuji tak minimálně 6.“ „Zdeňku, no tak, přece nás nebudeš napínat... Zdeňkuuuuu...“

(červenec 2021, nejmenované místo, nejmenovaná chemická akce)

Komplikovanost lidských vztahů byla odjakživa předmětem donekonečna opakovaných zábavných historek. Muži a ženy jsou každý z jiné planety, a jejich vzájemné nepochopení bylo inspirací mnoha básníků, skladatelů i spisovatelů. Ale proč by se vztahy nemohli zabývat i chemici? Jistě, mnoho biochemiků by vám vysvětlilo tu kaskádu metabolických drah, které se ve vašem těle spustí potom, co uvidíte svoji drahou polovičku. Genetici by vám zase objasnili, proč jsme přitahováni převážně k jednomu určitému typu lidí. Pojďme se ale na tuto problematiku podívat trochu netradičně, a to z hlediska vznikání a zanikání lidských vztahů, které můžeme modelovat úplně stejně jako vznik a zánik chemických vazeb.

Jednou z charakteristik chemické reakce je takzvaný (celkový) řád reakce. Jde o číslo, které určuje závislost rychlosti reakce na koncentraci všech reaktantů. Pokud je reakce navíc elementární (tedy jednokrokový proces, který nelze rozdělit na více menších reakcí), jde vlastně o součet stechiometrických koeficientů všech reaktantů. Někdy je navíc nutné zvážit, jaké koncentrace vystupují v dané reakci jako proměnné.

Uvažujeme-li například „elementární reakci“ mezi Zdeňkem a 3 dívkami, její celkový řád je 3, protože čím více bude v okolí Zdeňka dívek, tím rychleji bude tato reakce probíhat (obrázek 1). Zároveň ale nelze zvýšit „koncentraci“ Zdeňka, a proto na ní reakční řád nezávisí.



Obrázek 1. Schéma reakce Zdeňka s dívkami

1. Určete celkový řád reakce u níže popsaných situací vzniku a zániku lidských vztahů na táboře. K problému přistupte tak, jako by šlo o elementární chemické reakce. Jak bylo naznačeno v úvodu, pro všechny úlohy předpokládejte, že Zdeněk může během celého tábora navázat vztah s neomezeným množstvím dívek, aniž by to ovlivnilo jeho schopnosti sbalit další. Zároveň dívky Zdeňka neopouštějí, pokud již jednou byly sbaleny, pokud není uvedeno jinak.

Nápověda: zamyslete se, co se stane s rychlostí reakce, pokud na tábor přijede více dívek nebo chlapců.

- a) Zdeněk je nejhezčí kluk na táboře, a proto bez ohledu na to, jak se zrovna chová, to k němu přitahuje všechny dívky.
- b) Zdeněk má konkurenci v podobě ostatních hezkých chlapců na táboře. Musí se snažit upoutat pozornost dívek, které si ale mohou vybírat, a proto nezávládně paralelně balit více dívek – vždy se věnuje jen jedné, jejíž přízeň se snaží v daném okamžiku získat.
- c) Zdeněk z tábora odjel o den dříve, a proto jsou chlapci i dívky osvobozeni od jeho vlivu a začínou mezi sebou navazovat vztahy.

Rychlost chemické reakce je matematicky možné popsat pomocí rychlostní rovnice. Ta typicky dává do vztahu aktuální množství reaktantů (vhodně vyjádřené například jako koncentrace, tlak, ...) a rychlost reakce pomocí rychlostní konstanty charakteristické pro danou reakci při daných podmínkách. Po vyřešení diferenciálního tvaru této rovnice získáme závislost množství dané látky na počátečních podmínkách a rychlostní konstantě. Obecný tvar rychlostní rovnice pro elementární reakci $a A + b B \rightarrow c C + d D$ s rychlostní konstantou k je

$$v = k \cdot [A]^a \cdot [B]^b.$$

Koeficienty a a b jsou takzvané dílčí reakční řády, celkový řád reakce z otázky 1 je součet $a+b$.

2. Uvažujte mezilidské situace popsané v bodech 1 a., b., c. výše a uveďte, jaké jednotky bude ideální použít pro rychlostní konstantu, podíváme-li se opět na situace z kinetického hlediska. Svou odpověď zdůvodněte.

Abychom zjistili, jak Zdeněk navazuje vztahy v praxi, vydáme se za ním přímo na zmíněný tábor. Již při příjezdu odhadujeme, že tábor má asi 120 účastníků, z toho 60 % dívek. Od vedoucích jsme se dozvěděli, že tábor trvá 14 dní a Zdeněk sbalil 3 účastnice již první den. Pro otázky 3–5 předpokládejme, že interakce Zdeňka s okolím se řídí způsobem popsaným v bodě 1a.

3. Kolik celých dnů bude trvat Zdeňkovi navázání vztahu s polovinou účastnic? Sthne to do konce tábora?

Na jedné z chemických akcí bylo experimentálně zjištěno, že pokud se počet osob ženského pohlaví v okolí Zdeňka začne blížit nule, Zdeněk začne navazovat vztahy i s příslušníky stejného pohlaví, tedy muži. Protože ale jeho osobnostní kouzlo působí na muže minimálně, je Zdeňkova rychlostní konstanta navazování vztahů s muži $5\times$ menší než rychlostní konstanta navazování vztahů se ženami.

4. Pokud jistá chemická akce s minimálním počtem dívek trvala 11 dní a nacházelo se tam 12 mužů Zdeňkova věku, s kolika z nich si stihl dát pusu?

Doposud nás zajímalo, kolik je schopen Zdeněk sbalit holek za daný čas. Nelze ale předpokládat, že s ním všechny tyto dívky vydrží navždy. Pokud totiž potká jednu ze svých přítelkyň, ale přitom zrovna flirtuje s jinou dívkou, jeho přítelkyně se s ním velmi pravděpodobně rozejde. Rychlostní konstanta rozchodu dívký se Zdeňkem je $1,48 \text{ den}^{-1}$.

5. Uvažujte stále stejnou situaci na táboře se 120 účastníky a 60 % dívek, které se ale nyní začnou se Zdeňkem rozcházet.

a) Napište rychlostní rovnice, které popisují rychlost vzniku Zdeňkových vztahů (1) a rychlost zániku Zdeňkových vztahů (2). Poté je využijte k zápisu jediné rychlostní rovnice popisující, jak se mění celkový počet Zdeňkových vztahů.

b) Kolik je Zdeněk schopen dlouhodobě udržet paralelních vztahů na táboře, pokud předpokládáme, že se s ním dívky začnou rozcházet?

Nápověda: I přes neustálé rozchody a nové vztahy s dívkami bude mít Zdeněk v této chvíli stále stejný počet přítelkyň. Jak rychle se poté mění celkový počet Zdeňkových vztahů?

Na prvním táboře se Zdeňkem dívky zjistily „co je zač“, a tak se na příští rok psychicky připravily a začaly se svádění bránit. Zdeněk tak již nemohl spoléhat jen na kouzlo osobnosti a musel se pokusit o aktivní balení. To nyní probíhá jako reakce 0. řádu. V následujících úlohách uvažujte opět pouze balení bez rozhodů.

Existují i jiné způsoby, jak zvýšit rychlost navazování lidských vztahů. Jedním z prokazatelně fungujících metod je vystavení objektu našeho zájmu omamným účinkům alkoholu, který sníží mentální bariéru k bližšímu seznámení. Díky plnoletosti všech účastníků tábora Zdeňkovi nic nebránilo ve využití této metody, a tak na táborovou diskotéku sehnal láhev rumu s obsahem alkoholu 40 objemových %.

6. Kolik molekul ethanolu se nachází v malém panáku rumu? Potřebné údaje vyhledejte v tabulkách. V úlohách 6 a 7 uvádějte *všechny* konstanty na 4 platné číslice (například číslo 123400,567 byste tak zapsali jako $1,234 \cdot 10^5$).

Nyní se pokusíme tyto změny v rychlosti navazování vztahů kvantifikovat. Za normálních okolností je teplota na táboře 20 °C, Zdeněk musí vynaložit 5 kJ (mol dívek)⁻¹ energie, aby spolu začali chodit, a rychlost získávání přítelkyň je 2 dívky den⁻¹. 1 molekula ethanolu z panáků, které nalévá všem dívkám na diskotéce, sníží tuto aktivační bariéru o přesně 0,04191 eV (mol dívek)⁻¹. Díky spoustě namačkaných lidských těl na parketu můžeme také předpokládat vyšší teplotu, a to příjemných 32 °C.

Závislost rychlostní konstanty na teplotě a aktivační energii reakce popisuje Arrheniova rovnice

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}},$$

kde k je rychlostní konstanta, A je předexponenciální faktor (maximální dosažitelný počet srážek typický pro danou reakci), E_a je aktivační energie, R je univerzální plynová konstanta a T termodynamická teplota (vše v jednotkách SI).

7. Zdeněk by rád díky diskotéce navázal vztah s 10 dívkami denně. Kolik malých panáků musí nalít každé z nich, aby tohoto svého cíle dosáhl? Uvažujte teplotní závislost podle Arrheniovy rovnice.

Jak jsme již zmínili, poté co dívky přišly na Zdeňkovu pravou tvář, musel se o jejich pozornost začít aktivně zajímat. To ale samozřejmě nemohl dělat 24 hodin denně. Zdeněk každý den 8 hodin prospal, 6 hodin se účastnil táborového programu, 1 hodinu jedl a 15 minut strávil hygienou. Veškerý zbylý čas věnoval své oblíbené zábavě – balení holek. Diskotéka se během tábora konala 3× a vždy trvala 5 hodin.

8. Vypočítejte, kolik dívek nakonec podlehl Zdeňkovým svodům v druhém roce konání tohoto 14denního tábora, jestliže 1 den uvažovaný v rychlostních konstantách odpovídá 24 hodinám aktivního balení. Uvažujte stejné početní složení jako v prvním roce konání tábora; panáky Zdeněk nalije všechny najednou vždy na začátku diskotéky. Pro řešení můžete využít některé údaje z otázky 7.

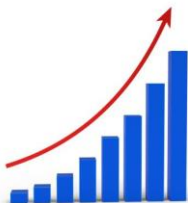
Doufám, že dívčí část řešitelů tato úloha neodradila od setkání s muži ani od dalšího studia chemie. Zdeněk v této úloze je unikátní osobou, která svou existencí poskytla inspiraci k napsání hned několika chemických úloh. Nyní je třeba rozšířit povědomí o jeho existenci i do ostatních oborů.

9. Vymyslete krátkou (alespoň 4 verše) báseň o Zdeňkovi.

Úloha č. 4: Optimalizační, část II.

(11 bodů)

Autoři: Jan Stoklasa a Jakub Krieger



„Vážení výkonní řediteli, dovoluji si Vás informovat o stavu v naší fabrice za uplynulé dva měsíce. Naši zákazníci jsou nadměrně spokojeni, a poptávka po našich produktech roste. Naopak naši zaměstnanci moc spokojeni nejsou – stěžují si na nízké platy a suboptimální pracovní podmínky. Myslím, že se nabízí jediné východisko: rozšířit naši výrobu, abychom odpověděli na poptávku, a ze získaných peněz adekvátně ocenit naše zaměstnance.“

Asi už chápete, že mít ve své fabrice jen jeden reaktor na výrobu amoniaku určitě není z hlediska zisků „*neoptimálnější*“. Vaším úkolem v druhé části optimalizační proto bude rozšířit Vaši fabriku, a znásobit tak Vaše zisky.

Při tom budete pracovat s poměrně velkým množstvím dat. Provádět optimalizaci stylem „tužka–papír“ by bylo přinejmenším zdlouhavé. Proto bude tato část úlohy zaměřená na práci s tabulkovým editorem, který Vám práci usnadní. Nejprve si ukážeme pár užitečných triků, které tabulkové editory umí.

1. Stáhněte si tabulku pro úkol 1 na odkazu pod čarou⁴. Splňte úkoly a) až e), které v tabulce naleznete na jednotlivých listech. Vyplněnou tabulku nám pošlete na KSICHTí mail⁵.

Nyní se podíváme trochu detailněji na zásobování. V první části jste počítali s cenou dopravy 0,8 Kč/(km kg), ale již jsme nespecifikovali, o jakou dopravu jde. Pojďme tedy rozhodnout, jestli je výhodnější produkty vozit po železnici nebo po silnici.

Pro názornost si výpočet velmi zjednodušíme – uvažujme nyní modelový příklad, kdy budeme dodávat pouze jeden produkt jednomu odběrateli.

Železniční přeprava je zatížena vysokými fixními náklady, tj. výdaji, které musíte platit, i když žádnou přepravu nerealizujete. Fixní náklady železnice jsme odhadli na 1 000 000 Kč (vztaženo na 1 přepravu 1 suroviny – pokud vypravíte pro jeden náklad 2 vlaky, tak fixní náklady zaplatíte jen jednou). Zároveň jeden

⁴ <https://ksicht.natur.cuni.cz/optimalizacni/>. Na odkaze je ke stažení též tabulka k úkolu 8. Pro editaci můžete použít jeden z volně dostupných programů (např. LibreOffice, OpenOffice) nebo MS Excel.

⁵ Soubor uložte ve formátu .ods, .xlsx nebo .xls, pojmenujte Příjmení_Jméno_Opt1 (vlozte své vlastní jméno) a pošlete na email jakub.krieger@ksicht.natur.cuni.cz

vypravený vlak má velkou kapacitu, řekněme 1200 tun, a cena přepravy tímto vlakem je 350 000 Kč/km. Zatímco nákladní silniční doprava má fixní náklady nulové (respektive v porovnání s železniční přepravou zanedbatelné), kapacita jednoho nákladního automobilu je výrazně menší než v případě vlaku. Náklady za silniční přepravu proto uvažujeme spojitě 0,8 Kč/(km kg).

Nápověda: Uvažujte, že náklady na provoz hnacího vozidla jsou ve výši 350 000 Kč/km a za lokomotivu můžete bez dalších nákladů připojit vagony s kapacitou až 1200 tun. To znamená, že vlak s nákladem odpovídajícím polovině kapacity Vás vyjde stejně draze jako vlak s maximálním nákladem.

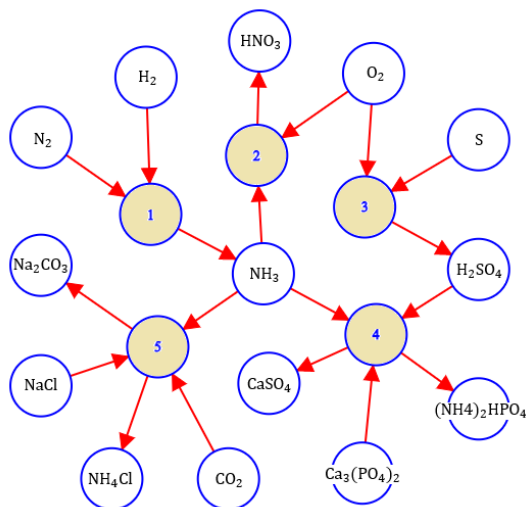
2. Jaké množství se vyplatí vozit po železnici a jaké po silnici? Sestrojte spojnicový graf, do kterého vynesete závislosti nákladů na přepravu (v Kč/km) na přepravované hmotnosti pro železniční a silniční dopravu. Graf sestrojte pomocí tabulkového editoru. Nezapomeňte na označení os grafu. Pokud posíláte řešení poštou, graf pošlete spolu s řešením úkolů 1 a 8 emailem. Napište, pro jaké hmotnosti je výhodnější použít silniční, a pro jaké železniční dopravu.
3. Pokud bychom dodávali každý den 450 tun uhličitanu sodného do Pardubic, vyplatí se nám silniční, nebo železniční přeprava? Změnilo by se něco, kdybychom zavážku prováděli jenom 1× za 10 dní, tj. jednou za 10 dní bychom přepravili 4500 tun? Fixní náklady započítejte stále pouze 1× a považujte je za neměnné.

Pro úplnost poznamenejme, že se v této otázce dopouštíme dost velkých zjednodušení situace, kdy nezohledňujeme rychlost přepravy, možnost najednou přepravit více druhů nákladu, kombinace obou způsobů přepravy, ale i obecnou (ne)vhodnost přepravy daným způsobem. Typicky například kapalné materiály se po silnici přepravují obtížně – jednak kvůli bezpečnosti, jednak i kvůli relativně vysoké hustotě, která limituje množství přepravovaného nákladu tak, aby nebylo silniční vozidlo přetíženo.

Ted' už ovšem nastal čas vrhnout se na totální optimalizaci Vaší fabriky. Vaším cílem je najít takovou kombinaci vyřizovaných poptávek z tabulky 1, která Vám dá největší denní zisk. Pro přehlednost jsme také přiložili schéma chemických procesů, ze kterých máte na výběr (obrázek 1).

Tabulka 1. Poptávky po chemikáliích vybraných českých chemických fabrik

Odběratel	Unipetrol Litvínov	Spolchemie Ústí	Synthesia Pardubice	Precheza Přerov	CHEZA Valmez	Vlastní výroba
Vzdálenost (km)	120	160	270	460	520	0
Poptávky (t/den)						
NH ₃	300	200	50	150	100	?
HNO ₃	200	400	100	150	200	?
H ₂ SO ₄	350	250	50	90	50	?
(NH ₄) ₂ HPO ₄	55	400	100	0	240	?
CaSO ₄	500	400	150	43	92	?
Na ₂ CO ₃	10	150	450	50	320	?
NH ₄ Cl	96	4	44	39	77	?



Obrázek 1. Schéma výrobních procesů znázorněné orientovaným grafem. Čísla odpovídají jednotlivým výrobním procesům

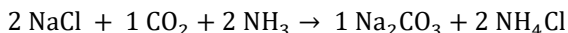
4. V Tabulce 1 si zvláště všimněte sloupce „Vlastní výroba“. Produkty některých procesů totiž můžete použít jako výchozí látky pro další procesy. Na základě schématu na Obrázku 1 určete, o jaké látky jde.

S poptávkami po vlastní výrobě můžete zacházet úplně stejně jako s poptávkami ostatních odběratelů. Sami sobě za vyřízenou poptávku zaplatíte, a pak si sami od sebe výchozí látky pro další reakce koupíte.

5. S ohledem na otázku 4 napište pořadí, ve kterém byste optimalizaci procesů 1–5 provedli. Stručně komentujte, jaké podmínky musí být v pořadí splněny.

Nápověda: Uvědomte si, že pro optimalizaci daného procesu potřebujete znát poptávky pro produktech procesu od všech odběratelů, včetně vlastní výroby.

Trnem v oku pro Vás možná jsou procesy 4 a 5. Mají dva produkty, které jsou ale svázané jednou stechiometrickou rovnicí, a proto nelze provést optimalizaci pro každý produkt zvlášť. Co s tím, si ukážeme na procesu 5.



6. Vypočítejte, jakou hmotnost NaCl potřebujete denně vyprodukovat pro:

- splnění denní poptávky Prechezy Přerov po Na_2CO_3 ?
- splnění denní poptávky Prechezy Přerov po NH_4Cl ?

Jak vidíte, pokud chcete splnit denní poptávku Prechezy Přerov po obou těchto látkách, budete muset jednu z nich produkovat v nadbytku. Za likvidaci látek, které vyprodukujete v nadbytku, nic neplatíte – prostě je vylijete do nejbližší řeky a *určitě*⁶ to nebude mít žádné negativní následky.

Pro naši optimalizaci bude užitečné zavést veličinu „poměr vstupních látek“. Její význam si ukažme opět na procesu 5. Tato veličina by měla pro tento proces být:

- větší než 1, pokud je hmotnost NaCl potřebná pro splnění poptávky po Na_2CO_3 větší než hmotnost NaCl potřebná pro splnění poptávky po NH_4Cl
- menší než 1, pokud je tomu naopak.

7. Vypočítejte číselnou hodnotu poměru vstupních látek pro případ z otázky 6. tj. pro plnění poptávky Prechezy Přerov.

V poslední části úlohy konečně zužitkujete znalosti nabyté v úkolu 1. Nastal čas na totální optimalizaci!

8. Stáhněte si tabulku pro úkol 8 z odkazu uvedeného v úkolu 1. Splňte úkoly a) až d), které najdete v listu „Úkoly“. Vyplněnou tabulku nám pošlete na KSICHTí mail⁷. Bez ohledu na výsledky úkolu 3 dále uvažujte, že poptávky vyřizujete denně, nikoliv jednou za 10 dní.

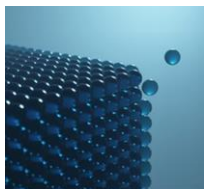
⁶ <https://ct24.ceskatelevize.cz/domaci/3455660-police-ukoncila-vysetrovani-otravy-becvy>

⁷ Tabulku uložte ve formátu .ods, .xlsx nebo .xls, pojmenujte Příjmení_Jméno_Opt8 a pošlete na email jakub.krieger@ksicht.natur.cuni.cz. Pokud posíláte i první tabulku, pošlete obě v jednom emailu.

Úloha č. 5: Povrchní

(16 bodů)

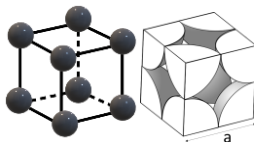
Autorka: Miroslava Novoveská



„In science there are no ‘depths’; there is surface everywhere.” – Rudolf Carnap

Poznámka: Velká část úloh požaduje náčrtky jako součást řešení, pokud (jako já) nejste výtvarně zdatní, doporučuji rýsovat nebo doplnit komentáři/stručným popisem. Estetická zdatilost náčrtků nebude bodově hodnocena, nicméně musí z nich jednoznačně vyplývat všechny informace.

Než se dostaneme k povrchům, pojďme se podívat na krystalické struktury ve 3D. Základní struktura, která se používá k popisu krystalů, je takzvaná elementární buňka. Jejím periodickým opakováním do všech směrů lze vytvořit celý krystal.



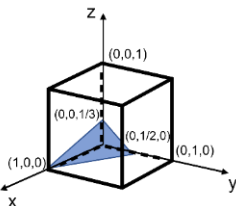
Obrázek 1. Primitivní elementární buňka. Model vpravo⁸ s reálnými proporcemi, atomy se poděl nejkratší vzdálenosti dotýkají.

1. Načrtněte prostorově centrovanou a plošně centrovanou elementární buňku – obě v krychlové soustavě. Kolik atomů obsahuje jedna elementární buňka u každé z těchto struktur? Pozor, některé atomy zasahují dovnitř buňky jen z části! Určete také koordinační číslo atomů v těchto strukturách.
2. Dvě nejdůležitější krystalické struktury železa jsou α -Fe (prostorově centrovaná, $a = 2,8665 \text{ \AA}$) a γ -Fe (plošně centrovaná, $a = 3,5753 \text{ \AA}$). Za využití počtu atomů Fe v jedné elementární buňce, zadaných mřížkových parametrů (a) a atomové hmotnosti železa vypočítejte hustoty těchto dvou struktur.

Roviny a směry v krystalických strukturách se popisují pomocí Millerových indexů. Popis směrů je ekvivalentní vektorům, u rovin je ale trochu složitější. Podívejme se na příklad roviny znázorněné níže (Obrázek 2), protíná osu x v bodě $(1;0;0)$, osu y v bodě $(0;1/2;0)$ a osu z v bodě $(0;0;1/3)$. Pomocí Millerových indexů ji zapíšeme jako (123) – tj. převrátíme hodnoty průsečíků. Pokud i tak získáme zlomek, dál se označení upravuje, ale to v této úloze nebude třeba. V případě, že rovina protíná některou z os v záporných hodnotách, umístí se nad příslušný

⁸ Cdang (original GIF, SVG version), Samuel Dupré (3D model with SolidWorks), CC BY-SA 3.0, via Wikimedia Commons, upraveno

Millerův index minus ($\bar{1}\bar{2}3$). Pokud rovina osu vůbec neprotíná, je hodnota příslušného indexu 0.



Obrázek 2. Část roviny $(1\bar{2}3)$ – znázorněno modře

3. a) Do prázdných krychlí s jedním vrcholem $(0,0,0)$ a stranou o velikosti 1 vyznačte roviny (100) , (110) , (111) , (143) a $(0\bar{2}5)$ a jednoduše popište, kde bude každá z rovin protínat souřadnicové osy a proč.
- b) Na separátních náčrtcích vyznačte v elementární buňce prostorově centrované struktury atomy, které leží v rovinách (100) a (110) , a v elementární buňce plošně centrované struktury atomy v rovinách (100) , (110) a (111) (celkem pět náčrtků). Nakreslete uspořádání atomů v těchto pěti rovinách (tzn. 2D řezy krychlemi).

Uspořádání atomů v jednotlivých rovinách je zajímavé právě díky možnosti, že se část krystalu odštěpí a vznikne nový povrch. Tvorba nového povrchu je však energeticky náročná. Není tak náhodou, že povrchy, které stojí méně energie, budou při štěpení krystalu vytvářeny přednostně, a v určitých směrech se tak krystal bude snadněji štěpit.

4. U každého z uspořádání atomů, která jste nakreslili v podúloze 3:
 - a) Vyznačte rovnoběžník s rohy ve středech atomů obsahující dohromady právě jeden atom (součet částí různých atomů zasahujících dovnitř rovnoběžníku musí odpovídat jednomu atomu). Pokud vás napadá více různých rovnoběžníků, které odpovídají zadání, vyberte ten s úhly blíže 90° .
 - b) Vypočítejte obsah tohoto rovnoběžníku jako funkci *poloměru* atomů.
 - c) Kde jsou atomy uspořádané nejhustěji? Bude vytvoření takového povrchu nejvíce či nejméně energeticky výhodné? Porovnejte jej s jiným povrchem u stejné struktury a podpořte své vysvětlení jednoduchým výpočtem.

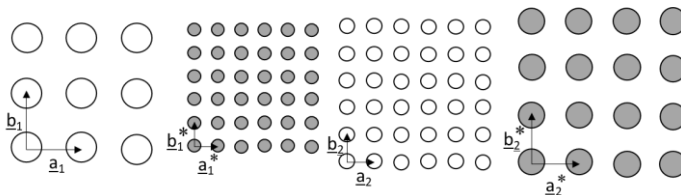
Jedním ze způsobů, jak lze získat informace o struktuře povrchu je elektronová difrakce (LEED, RHEED). Difrakční obrazec, který takto získáme, je zobrazen v takzvaném eciiprokém prostoru (zatímco krystal, který jsme

měřili, je v prostoru reálném) a závisí na struktuře krystalu následujícím způsobem:

- Parametry mřížky v difrakčním obrazci jsou nepřímo úměrné⁹ parametrům mřížky tvořené atomy.

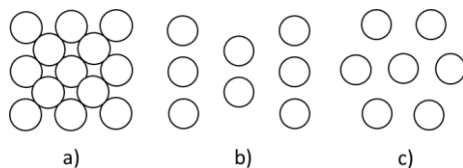
$$|\underline{a}^*| \propto \frac{1}{|\underline{a}|} \quad (1)$$

- Vektor \underline{a}^* je kolmý k vektoru \underline{b} , vektor \underline{b}^* je kolmý k vektoru \underline{a} .
- Intenzita difrakčních bodů je kromě jiného závislá na pravidelnosti povrchu a lze z ní například zjistit pozici adsorbovaných částic (o tom později).



Obrázek 3. Struktury povrchu krystalů (bílá) a jejich difrakční obrazce (šedá). Počet atomů/difrakčních bodů byl zvolen jen pro ilustraci, obojí se samozřejmě periodicky opakuje ve 2D. Na základě podmínky (1) je $\underline{a}_2^* = 2 \underline{a}_1^*$ kvůli $\underline{a}_1 = 2 \underline{a}_2$.

5. Nakreslete difrakční obrazce následujících struktur. Podúloha 4a může být nápomocná.

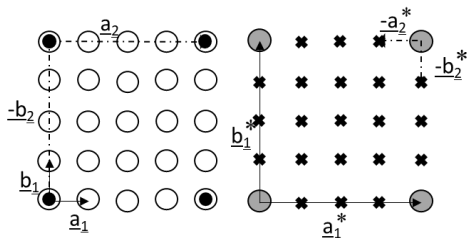


Obrázek 4. Struktury povrchu krystalů k podúloze 5

Na povrch krystalu mohou být periodicky adsorbovány atomy nebo molekuly jiné látky, které jsou pak také vidět v difrakčním obrazci. Podoba výsledného difrakčního obrazce je kombinací difrakčních obrazců struktury čistého povrchu a periodicky uspořádaného adsorbátu.

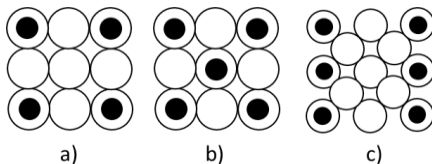
Nápověda: Protože je vzdálenost mezi jednotlivými adsorbáty často větší než mezi atomy povrchu, bude difrakční obrazec obsahovat více bodů odpovídajících adsorbátu.

⁹ \propto je znak pro „je úměrný“.



Obrázek 5. Vlevo – příklad struktury povrchu krystalu (bílá) s adsorbátem (černě). Vpravo – difrakční obrazec, šedé puntíky odpovídají povrchu + adsorbátu a černé křížky pouze adsorbátu

6. Nakreslete difrakční obrazce následujících struktur s adsorbátem. K vyznačení difrakčních bodů odpovídajícím pouze adsorbátu použijte křížky, difrakční body vzniklé díky struktuře povrchu i adsorbátu vyznačte puntíky.



Obrázek 6. Struktury povrchů krystalů (bílá) s adsorbátem (černá) k podúloze 6

Jedním z modelů, které popisují adsorpci částic na povrch, je Brunauerova-Emmettova-Tellerov (BET) isoterma. Na rozdíl od více známé Langmuirovy isotermy, která předpokládá tvorbu pouze jedné vrstvy adsorbátu na povrchu adsorbentu, BET teorie zahrnuje vznik více vrstev. BET isoterma je popsána rovnicí:

$$\frac{p}{V(p_0-p)} = \frac{1}{V_1c} + \frac{c-1}{V_1c} \frac{p}{p_0} \quad (2)$$

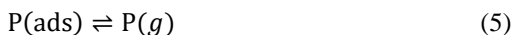
V je objem adsorbovaného plynu při tlaku p , p_0 je tlak nasycených par tohoto plynu, c konstanta charakterizující sílu interakcí a V_1 objem plynu adsorbovaný v první vrstvě (tj. pokrývající povrch adsorbentu). V_1 tak může být využit k odhadu plochy povrchu materiálů používaných k adsorpci.

7. Tlak nasycených par kryptonu při 77 K je 350 Pa, jeden jeho atom zabírá plochu cca 16 \AA^2 . Vytvořením grafu lineární závislosti určete hodnotu c a V_1 , zároveň využijte V_1 k odhadu plochy povrchu adsorbentu v m^2g^{-1} , pokud víte, že jej bylo použito 200 mg. Naměřená data upravená na standardní podmínky:

Tabulka 1. Data k úloze 7.

V/mm^3	477	550	614	683	764
p/Pa	25	50	75	100	125

Mnoho chemických reakcí je katalyzováno povrchy pevných látek (často přechodných kovů). Schéma takového procesu může vypadat následovně:¹⁰



Zde dochází k adsorpci plynného reaktantu A_2 na povrch, jeho disociaci a následné reakci s reaktantem B. Vzniklý produkt P poté desorbuje. Rychlostní konstanty každého kroku jsou k_n a k_{-n} pro přímý a zpětný směr (n je číslo rovnice).

Pokud zvolíme chytré reakční podmínky, můžeme studium takového procesu výrazně zjednodušit. V tomto případě uvažujme, že koncentrace produktu je v plynné fázi zanedbatelná (je selektivně odebírán – například jinou reakcí). Naopak oba reaktanty jsou do plynné fáze dodávány, a jejich tlak je tak konstantní. Zároveň uvažujme, že se mezi reaktantem A v plynné fázi a adsorbovaným na povrch vytvořila rovnováha. Posledním předpokladem bude, že produkt snadno desorbuje a jeho koncentrace na povrchu se proto téměř nemění.

Jako náповědu můžete použít následující výraz (5), který popisuje změnu koncentrace $\text{P}(\text{ads})$ v čase, a $K_3 = k_3/k_{-3}$:

$$\frac{\Delta[\text{P}(\text{ads})]}{\Delta t} = -(k_{-4} + k_5)[\text{P}(\text{ads})] + k_4[\text{A}(\text{ads})][\text{B}(\text{g})] \quad (5)$$

8. Za využití předpokladů uvedených výše vyjádřete rychlost vzniku plynného produktu (P) pomocí koncentrací reaktantů v plynné fázi a rychlostních konstant.
9. Na závěr uveďte příklad organické reakce, která je katalyzována povrchem kovu. Buďte kreativní a zkuste najít reakci, kterou jste dříve neznali.

¹⁰ g – plyn (gas); ads – adsorbovaný na povrchu.

Řešení úloh 3. série 21. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Neviditelné písmo

(9 bodů)

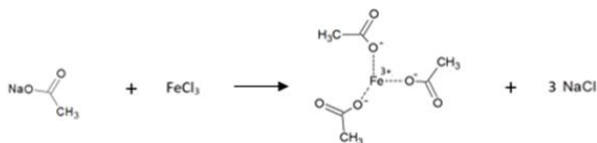
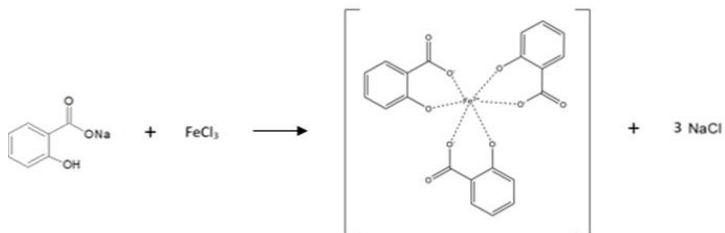
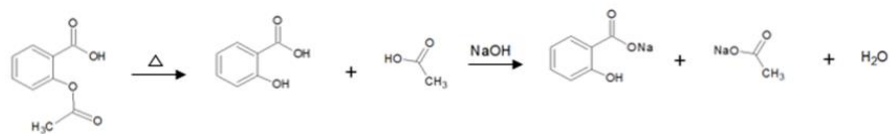
Autorka: Marie Mrvová

1. Pokus

1. Bezbarvý text zmodral.
2. Papír je napuštěn žlutou krevní solí (E536). Lze uznat i hexakyanidoželeznatan (ferrokyanid) sodný (E535) nebo vápenatý (E538).
$$4 \text{Fe}^{2+} + 3 \text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6] \rightarrow \text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3 + 12 \text{K}^+$$
3. V reakci působí jako oxidační činidlo (oxiduje Fe^{2+} na Fe^{3+}).
4. Berlínská (pařížská/pruská) modř, využívá se v umění při malbě olejem a temperou, v medicíně se používá jako protijed při užití toxických těžkých kovů, například thallia.
5. Žlutá krevní sůl se používá jako protispékavá látka v kuchyňské soli a slouží také k výrobě barviv.
6. Kyselina L-askorbová (vitamín C), působí v organismu jako antioxidant.
7. Děkujeme za zasláné fotografie.

2. Pokus

8. Chloridem železitým.
9. Kyselina acetylsalicylová, která se rozkládá na kyselinu salicylovou a kyselinu octovou.
10. Hydroxid sodný vysrážel z chloridu železitého hydroxid železitý, který má hnědé zbarvení. Ze sodné soli kyseliny octové vznikl po reakci s chloridem železitým hnědočervený octan železitý. Ke změně barvy mohl přispět i fialový komplex, který vznikl reakcí salicylanu sodného s chloridem železitým.
11. Chemické rovnice reakcí jsou uvedeny níže.



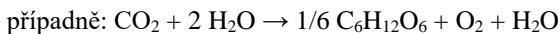
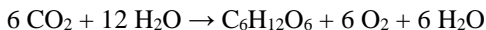
12. Děkujeme za zasláné fotografie.

Otázka 1 – 1 bod, 2 – 1 bod, 3 – 1 bod, 4 – 0,5 bodu, 5 – 0,5 bodu, 6 – 0,5 bodu, 7 – 0,5 bodu, 8 – 0,5 bodů, 9 – 0,5 bodů, 10 – 1 bod, 11 – 1 bod, 12 – 1 bod. Celkem 9 bodů.

Úloha č. 2: C3, C4 a CAM nebo snad KAM?**(8 bodů)**

Autorka: Veronika Vetyšková

1. Vyčíslená rovnice fotosyntézy je následující:

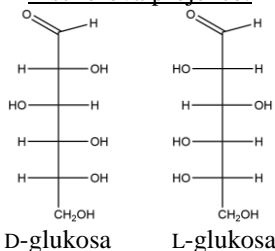
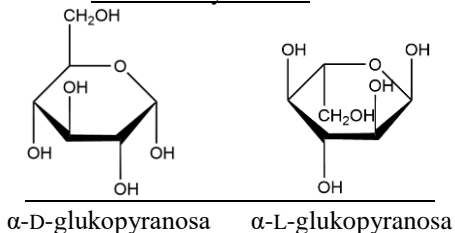


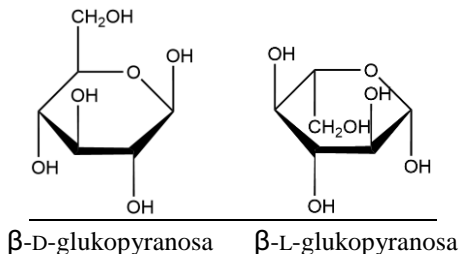
2. Vzorec oxidu uhličitého je uveden níže. Molekula bude mít tvar přímky a vazebný úhel bude
- 180°
- . Tvar přímky zaujímá z toho důvodu, že centrální atom nese volné elektronové páry, a tak se k němu koordinované atomy položí co nejdál od sebe.



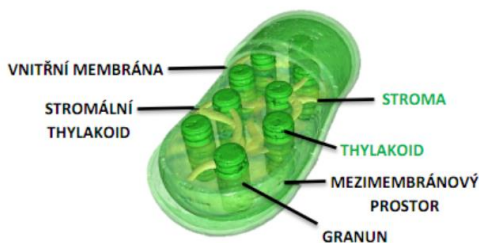
3. Tuhý oxid uhličitý se nazývá suchý led, který při atmosférickém tlaku vzniká při ochlazení pod
- -80°C
- . Použit se dá k mnoha účelům. Organičtí chemici ho používají pro chlazení reakční směsi či přímo jako reaktant (v reakcích, jako je Grignardova syntéza kyselin), biochemici při přenosu vzorků, které musejí zůstat zmrzlé. Lze použít i za účelem rychlého zmrazení vzorků, nebo prostě jen na efekt při vánočním večírku (při vhození do nápojů produkuje bílý dým, popřípadě se s ním dají rychle zmrazit různé zábavné předměty).

4. Vzorce glukózy jsou následující.

Fischerova projekce:Haworthovy vzorce:

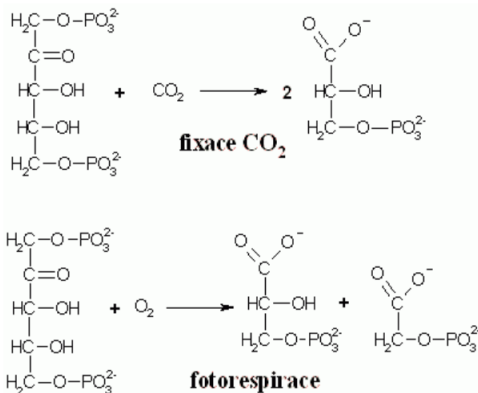


5. Průřez chloroplastem



Převzato z: <http://e-chembook.eu/fotosynteza>

6. Enzym se nazývá RUBISCO z anglického názvu *ribulose-1,6-bisphosphate carboxylase/oxygenase*. Jak je tedy patrné, může katalyzovat karboxylační reakce a fixovat CO_2 , ale katalyzuje i reakci oxygenační, a tím se podílí na fotorespiraci. V první reakci dochází ke vzniku dvou molekul 3-fosfoglycerátu. Ve druhé kromě 3-fosfoglycerátu vzniká ještě 2-fosfoglykolát.



Převzato z: https://vydavatelstvi-old.vscht.cz/knihy/uid_es-002_v1/hesla/fotorespirace.html

7. Jedním z hlavních důvodů je vyšší energetická náročnost metabolismu C4 rostlin, kvůli které potřebují C4 rostliny více energie a tepla.
8. U C4 rostlin je primárním akceptorem CO₂ fosfoenolpyruvát a vzniká čtyřuhlíkatý oxalacetát. Ten je následně redukován na malát, který je transportován do jiných buněk, kde je dekarboxylován; tím je zde dosaženo vyšší koncentrace CO₂ a fotorespirace je potlačena.
9. Starší rostliny mívají jednu velkou rozsáhlou vakuolu, na rozdíl od mladších, kde se v rostlinných buňkách vyskytuje několik menších vakuol.

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

Úloha č. 3: Šokující

(10 bodů)

Autor: Vít Novotný

1. Dusík se musí před vstupem do půdy *přeměnit na formy rozpustné ve vodě*. Důležitou roli mají v tomto procesu anaerobní organismy disponující enzymem *nitrogenázou*. Ty přemění vzdušný dusík na amoniak a následně na organické sloučeniny. Rozkladem organických sloučenin vzniká amoniak, který půdní bakterie oxidují na *dusičnany*, jež jsou dostupné rostlinám.

Průmyslová hnojiva proto využívají rozpustné formy dusíku, například dusičnan amonný, dusičnan draselný nebo močovinu.
2. Dusičnany jsou oxidační činidla na suché cestě, pro oxidační reakce v roztoku (například pro oxidaci jodidu na jod) je potřeba použít oxidační činidlo na mokré cestě, například manganistan nebo dichroman. Důvodem je vysoká stabilita dusičnanového aniontu ve vodném prostředí. Oxidační schopnosti by se začaly projevovat až po naprotonování dusičnanu silnější kyselinou.
3. a) Byli nazýváni sanytrníci, případně sanytráci.
b) Sanytrníci seškrabovali ledky ze stěn stájí a chlévů, tedy obecně z míst, kde nitrifikační a nitratační bakterie produkovaly dusičnany z organického odpadu bohatého na dusík, například z hnoje a močůvky. Dusičnany následně krystalizovaly na vápenných stěnách. Pokud bylo potřeba ledku víc, sanytrníci dusíkaté odpady (zbytky jídla, hnůj, mršiny...) nechali tlít v jamách nebo zděných prostorách, odkud je nechávali krystalizovat.
c) Ledek poznali po (ledově) chladivé chuti. Dusičnan má totiž kladnou disociační entalpii, jeho rozpuštění tedy odebírá z okolí teplo.
4. Spojujícím tématem je těžba dusičnanů. Druhou tichomořskou válku vedla Chile proti konfederaci Bolívie a Peru právě o ledková ložiska v poušti Atakama. Humberstone bylo od 70. let 19. století jedním z center těžby, která odpovídala na rostoucí světovou poptávku. Po první světové válce však došlo spolu s rozšířením průmyslového procesu syntézy amoniaku k jejímu útlumu; od 60. let 20. století se z Humberstone stalo město duchů, v současnosti pod ochranou UNESCO.
5. Haber je znám jako *otec chemické války*. K dráze chemika jej inspiroval jeho otec, obchodník s barvivy a léčivy, mladý Fritz měl oporu ve svém strýci, který mu poskytl prostor pro první chemické experimenty.
6. $N_2(g) + 3H_2(g) \rightarrow 2NH_3(g)$; změna entalpie $H = -91,8 \text{ kJ mol}^{-1}$.
Na levé straně je dvakrát více částic než napravo.

7. a) Chemický systém, který byl v rovnováze, reaguje na vnější změnu podmínek posunem rovnováhy tak, aby tuto změnu potlačil.
- b) Tato část úlohy byla obecně nejchybovější. Obecným východiskem pro správné rozhodnutí mohou být podobné úvahy:

Termokinetika: odpovídá na otázku *jak snadno a rychle*, neřeší ale, jestli je produkt energeticky výhodný.

Termodynamika: řeší pouze, jak energeticky výhodný je produkt, neřeší vůbec, jak se k němu dostat. Například tento papír ve vaší ruce je termodynamicky nestabilní – směs oxidů biogenních prvků je termodynamicky mnohem stabilnější. Samovolně ale na vašem stole neshoří, neboť kineticky stabilní je.

- Bomba ležící již 80 let na dně Labe je *termokineticky* stabilní. Po dodání dostatečné aktivační energie ale dojde k uvolnění velkého množství energie, *termodynamicky* je tudíž nestabilní.
 - Alfa substituovaný naftalen je produktem reakce řízené *termokineticky*. Bez ohledu na stabilitu produktu je rychlejší se k tomuto produktu dostat, je třeba nižší aktivační energie.
 - Směs dusíku a vodíku je *termokineticky* stabilní, začne reagovat až po dodání velké aktivační energie.
8. Reakce je exotermická, teplo lze považovat za „produkt reakce“. Proto ohřátím reakční směsi dojde k posunu reakční rovnováhy směrem k výchozím látkám. Na straně výchozích látek je dvojnásobné látkové množství reaktantů. Jelikož jsou tyto látky plynné, mají dvojnásobný tlak oproti produktu, který by jejich plným zreagováním vznikl. Na zvýšení tlaku proto systém odpoví posunem rovnováhy na stranu produktů. Pro dosažení uspokojivého výsledku se provozní tlak reaktoru pohybuje okolo v rozmezí 15–25 MPa. Pneumatiky osobních vozů se nafukují na tlak v rozmezí 2 do 3 bar, používaný tlak je tedy řádově stonásobný. Právě zvládnutí tak náročných reakčních podmínek byla udělena v roce 1931 Carlu Boschovi a Friedrichu Bergiusovi Nobelova cena. Na optimalizaci procesu se významně podílel také Alwin Mittasch, kterému se však této pocty nedostalo.
9. Podle <http://www.gold.metalle-preisvergleich.com/> je cena čistého zlata 1 781,68 € za unci, podle <https://www.osmium-preis.com/de/> je cena čistého osmia 1 854,20 € za gram, tedy $1\,854,2 \cdot 31,103 = 57671,2$ € za unci. $57671,2/1\,781,68 = 32,37$. Krystalicky čisté osmium je tedy oproti krystalicky čistému zlatu řádově 30krát dražší. Bosch vynalezl katalyzátor na bázi železa.

10. Vodík pro syntézu amoniaku, základní surovinu pro výrobu hnojiv, se získává parním reformováním zemního plynu; reformování i samotná syntéza jsou energeticky náročné. Souvislost s cenou plynu a energií obecně je patrná.
11. Einsteinova první manželka se jmenovala Mileva, rozená Marićová, manželství se udrželo až do roku 1919.
12. Einstein byl pacifista, soudobé nacionalistické nadšení nesdílel a Manifest 93 navzdory společenským tlakům nepodepsal. Vyberme první bod Manifestu. Vyvrátit lze již tvrzení „...*Ani lid ji (válku) nechtěl, ani vláda, ani císař.*“ Čerstvě sjednocené Německo zažívalo za vlády Viléma II. silnou hospodářskou konjunkturu. Podobně jako Anglie by proto rádo získalo kolonie, s nimiž by mohlo obchodovat výrobky i suroviny, toužilo rovněž po uznání za světovou velmoc. Tyto snahy byly reprezentovány i osobou samotného Viléma II. V Německu probíhalo intenzivní zbrojení, to může být demonstrováno koncepcí velkoadmirála Tirpitzte spočívající ve vybudování loďstva schopného porazit loďstvo britské. Německo tedy, spíše než aby „*chránilo světový mír*“, čekalo na záminku k vojenskému naplnění svých záměrů. (ŠKÁCHA, Libor: Závody ve zbrojení mezi Velkou Británií a Německem před první světovou válkou. Magisterská práce. Brno: Katedra mezinárodních vztahů a evropských studií Fakulty sociálních studií Masarykovy univerzity, 2016.) Nejčastěji vámi vyvráceným bodem bylo tvrzení o porušení belgické neutrality.
13. a) Plyn byl poprvé nasazen v dubnu 1915 u Yper, šlo se o chlor.
b) Fosgen je průmyslové chlorační činidlo. LoSt je označení bojového plynu; jde o iniciály Wilhelma Lommela a Wilhelma Steinkopfa, Haberových kolegů, kteří tento plyn připravili. Obecně je známější jako yperit nebo hořčičný plyn.
c) Fosgen je látka dusivá, yperit zpuchýřující. Fosgen účinkuje okamžitě, ve vlhkém prostředí dýchacích cest se rozloží na chlorovodík nebo substitučním mechanismem chloruje plicní tkáň. Při dostatečné dávce tím způsobí udušení do několika minut, v menších plicní edém. Yperit vstupuje do organismu i kůží, způsobí alkylaci DNA, a zastaví tím nejdůležitější buněčné procesy. Zapříčiní zpuchýřování a odumření zasažené tkáně, příznaky otravy se však projeví až po několika hodinách.
14. Claire Haber se zabývala výzkumem antidot při otravách chlorem. Při restrukturalizaci, jejímž účelem bylo urychlit vývoj jaderných zbraní, však bylo její pracoviště zrušeno. Clara Haber následně spáchala sebevraždu.
15. Tímto insekticidem byla kyselina kyanovodíková nasáklá do křemeliny, obchodním názvem Cyklon B. Otrava je způsobena blokadou enzymu cytochrom

c oxidázy. Enzym se podílí na přenosu náboje skrz buněčnou membránu a vzniku membránového potenciálu umožňujícího buněčné dýchání.

16. Vědcův výzkum, jeho společenská angažovanost nebo osobní život nemusí být striktně odděleny. Příkladem může být zmíněný Einstein: pro potvrzení jeho teorie byla potřebná měření, která však mohli v dané době vykonat pouze angličtí astronomové. Ti však byli v těsně poválečné době velmi neochotní spolupracovat s Němcem. Einsteinovo odmítnutí Manifestu 93 navázání spolupráce významně usnadnilo. Kdyby Einstein Manifest podepsal, mohlo dojít ke zpoždění rozvoje teorie relativity. Podepsání Manifestu by tedy bývalo mohlo mít stejný důsledek jako například teoreticky horší schopnost geometrického myšlení.

Vědec je člověk. V důsledku toho se jeho odborná práce, občanská aktivita nebo rodinný život setkává v jeho lidství. To platí i o Fritzi Haberovi, k čemuž jste často v různých formulacích dospěli ve svých řešeních. Body byly udělovány za jakoukoliv diskuzi, bodové ohodnocení bylo snižováno pouze za použití fakticky chybných argumentů.

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

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

Autoři: Jan Stoklasa a Jakub Krieger

1. Pokud je něco optimální, tj. nejvhodnější, tak už to nemůže být optimálnější.
2. Tabulka 1: Názvy vybraných chemických procesů a jejich vyčíslené rovnice

Číslo procesu	Název procesu	Sumární rovnice procesu
1	Haberova–Boschova syntéza	$3 \text{ H}_2 + \text{N}_2 \rightarrow 2 \text{ NH}_3$
2	Ostwaldův proces	$\text{NH}_3 + 2 \text{ O}_2 \rightarrow \text{HNO}_3 + \text{H}_2\text{O}$
3	Kontaktní proces	$2 \text{ S} + 3 \text{ O}_2 + 2 \text{ H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{ H}_2\text{SO}_4$
4	Produkce fosfátového hnojiva	$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 + 3 \text{ H}_2\text{SO}_4 + 4 \text{ NH}_3 \rightarrow 2 (\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4 + 3 \text{ CaSO}_4$
5	Houův proces	$2 \text{ NaCl} + \text{CO}_2 + 2 \text{ NH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Na}_2\text{CO}_3 + 2 \text{ NH}_4\text{Cl}$

Pro proces 5 se v české literatuře používá název Solvayův proces. V původním Solvayově procesu byl ovšem tehdy drahý amoniak recyklován. Po příchodu Haberovy–Boschovy syntézy amoniaku se jeho cena snížila, takže už tento recyklační krok nebyl potřeba, čehož využívá právě Houův proces.

Je nutno podotknout, že procesy ze schématu musí obecně probíhat výrazně odděleně (například pro Haberovu–Boschovu syntézu je síra katalytický jed).

Procesy rozepsané do několika dílčích reakcí byly hodnoceny polovinou bodů, jelikož v zadání bylo explicitně napsáno, že požadujeme souhrnné rovnice.

3. Řešení otázky 3 je v téže tabulce 1.
4. Cheb, Za Sokolov a Karlovy Vary byla udělena polovina bodů.
5. a) Obecně platí vztah

$$m(A) = \frac{a M(A)}{b M(B)} m(B)$$

kde A označuje výchozí látku a B označuje produkt. Pro chemickou rovnici $\text{N}_2 + 3 \text{ H}_2 \rightarrow 2 \text{ NH}_3$ to bude konkrétně:

$$m(\text{H}_2) = \frac{3}{2} \cdot \frac{2,02 \text{ g mol}^{-1}}{17,03 \text{ g mol}^{-1}} \cdot 1 \text{ kg} = 0,178 \text{ kg},$$

$$m(\text{N}_2) = \frac{1}{2} \cdot \frac{28,02 \text{ g mol}^{-1}}{17,03 \text{ g mol}^{-1}} \cdot 1 \text{ kg} = 0,822 \text{ kg}.$$

- b) Za 1 kg amoniaku zaplatíme $c(\text{NH}_3)$

$$c(\text{NH}_3) = m(\text{H}_2)p(\text{H}_2) + m(\text{N}_2)p(\text{N}_2),$$

kde $p(\text{H}_2)$ je tržní cena vodíku a $p(\text{N}_2)$ je tržní cena dusíku. Konkrétně:

$$c(\text{NH}_3) = 0,178 \text{ kg} \cdot 180 \text{ Kč kg}^{-1} + 0,822 \text{ kg} \cdot 10 \text{ Kč kg}^{-1} = 40,2 \text{ Kč}.$$

Nadále budeme pro přehlednost označovat veličiny vztažené na 1 kg malým písmenem a veličiny vztažené na 1 den velkým písmenem. Cena za nějaké obecné množství amoniaku je tedy

$$c(\text{NH}_3) = 40,2 \text{ Kč kg}^{-1}.$$

Cena za výrobu množství amoniaku $C(\text{NH}_3)$ daného poptávkou $D(\text{NH}_3)$ je

$$C(\text{NH}_3) = c(\text{NH}_3) D(\text{NH}_3) = 40,2 \text{ Kč kg}^{-1} \cdot 300\,000 \text{ kg den}^{-1} = 12,1 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

- c) Denní cena za energii pro výrobu amoniaku $E(\text{NH}_3)$ je

$$E(\text{NH}_3) = e(\text{NH}_3)D(\text{NH}_3),$$

kde $e(\text{NH}_3)$ je cena za energii pro výrobu 1 kg amoniaku. Konkrétně:

$$E(\text{NH}_3) = 20 \text{ Kč kg}^{-1} \cdot 300\,000 \text{ kg den}^{-1} = 6,0 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

- d) Denní cena za dopravu amoniaku do Unipetrolu Litvínov $T(\text{NH}_3)$ je

$$T(\text{NH}_3) = t \cdot L(\text{Un}) \cdot D(\text{NH}_3),$$

kde t je cena za transport na km a $L(\text{Un})$ je vzdálenost Unipetrolu. Konkrétně:

$$T(\text{NH}_3) = 0,8 \text{ Kč kg}^{-1}\text{km}^{-1} \cdot 120 \text{ km} \cdot 300\,000 \text{ kg den}^{-1} = 28,8 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

- e) Denní cena reaktoru pro výrobu amoniaku, pokud uvažujeme provoz reaktoru po dobu 10 let, je:

$$R(\text{NH}_3) = \frac{75 \cdot 10^9 \text{ Kč}}{365,25 \text{ den rok}^{-1} \cdot 10 \text{ rok}} = 20,5 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

- f) Odběratel Vám za amoniak denně zaplatí $O(\text{NH}_3)$,

$$O(\text{NH}_3) = p(\text{NH}_3) \cdot D(\text{NH}_3),$$

kde $p(\text{NH}_3)$ je tržní cena amoniaku. Konkrétně:

$$O(\text{NH}_3) = 230 \text{ Kč kg}^{-1} \cdot 300\,000 \text{ kg den}^{-1} = 69,0 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

g) Celkový denní zisk vypočítáme jako příjmy – výdaje, tedy:

$$Z_{Unipetrol}(\text{NH}_3) = O(\text{NH}_3) - [C(\text{NH}_3) + E(\text{NH}_3) + T(\text{NH}_3) + R(\text{NH}_3)].$$

Konkrétně:

$$Z_{Unipetrol}(\text{NH}_3) = \{69,0 - (12,1 + 6,0 + 28,8 + 20,5)\} \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}$$

$$Z_{Unipetrol}(\text{NH}_3) = 1,6 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

Výsledek je kladný.

6. Denní zisk z dovozu amoniaku do Unipetrolu Litvínov jsme už určili – je to $2,9 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}$. Nyní spočítejme denní zisk z dovozu do Unipetrolu Litvínov a do Spolchemie Ústí. Stejně jako v úkolu 5 si pro Spolchemii Ústí vypočítáme cenu za chemikálie:

$$C(\text{NH}_3) = 40,2 \text{ Kč kg}^{-1} \cdot 200\,000 \text{ kg den}^{-1} = 8,0 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

Náklady na energie jsou:

$$E(\text{NH}_3) = 20 \text{ Kč kg}^{-1} \cdot 200\,000 \text{ kg den}^{-1} = 4,0 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

Náklady na transport jsou:

$$T(\text{NH}_3) = 0,8 \text{ Kč kg}^{-1}\text{km}^{-1} \cdot 160 \text{ km} \cdot 200\,000 \text{ kg den}^{-1} = 25,6 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

Spolchemie Ústí Vám zaplatí:

$$O(\text{NH}_3) = 230 \text{ Kč kg}^{-1} \cdot 200\,000 \text{ kg den}^{-1} = 46,0 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

Cenu za reaktor už máme zahrnutou hodnotě $Z_{Unipetrol}(\text{NH}_3)$. Proto ji už znovu nezapočítáváme. Celkový zisk lze spočítat podle vztahu:

$$Z_N(\text{NH}_3) = \sum_{j=1}^N \{O(\text{NH}_3)_j - [C(\text{NH}_3)_j + E(\text{NH}_3)_j + T(\text{NH}_3)_j]\} - R(\text{NH}_3),$$

kde index j značí jednotlivé odběratele, a znak $\sum_{j=1}^N$ znamená, že sčítáme příspěvky jednotlivých odběratelů od prvního až po N -tého, kde N je celkový počet odběratelů.

Konkrétně (pořadí čísel odpovídá obecnému vzorci):

$$Z_2(\text{NH}_3) = \{115,0 - (20,1 + 10,0 + 54,4) - 20,5\} \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}$$

$$Z_2(\text{NH}_3) = 10,0 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

Analogicky bychom postupovali pro 3 odběratele. Pro 3 odběratele vyjde denní zisk

$$Z_3(\text{NH}_3) = 7,6 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

Pro 4 odběratele

$$Z_4(\text{NH}_3) = -22,0 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

A pro 5 odběratelů

$$Z_5(\text{NH}_3) = -46,7 \cdot 10^6 \text{ Kč den}^{-1}.$$

Největší zisk tedy získáme dovozem do Unipetrolu Litvínov a do Spolchemie Ústí. Ještě je potřeba zkontrolovat, zda jsme nepřekročili kapacitu reaktoru. V tomto případě je výroba $500\,000 \text{ kg den}^{-1}$, což je méně, než kapacita reaktoru ($1\,200\,000 \text{ kg den}^{-1}$). Kapacita tedy nebyla překročena.

- Zvýšený tlak posouvá rovnováhu reakce směrem k menšímu množství plynných produktů, tedy k amoniaku. Zvýšená teplota posouvá reakci k výchozím látkám, ale je nutná pro zrychlení reakce. Bez toho by se proces za 10 let provozu reaktoru pravděpodobně nerozběhl. Častou odpovědí bylo, že zvýšení teploty je potřeba pro správnou činnost katalyzátoru. Z této odpovědi (domníváme se často převzaté z české wikipedie) cítíme nepochopení problému. Katalyzátor se totiž používá proto, abychom mohli použít co *nejnižší* teplotu.
- Body byly uděleny za zapsání celého oficiálního názvu (kvůli dohledání a kontrole řešení) a za správnou odpověď bude považován jakýkoliv ze zisků, který daná společnost vykazala. Například Spolek pro chemickou a hutní výrobu, akciová společnost, dosáhl v roce 2021 čistého zisku 1 428 372 000 Kč, zisku před zdaněním ve výši 1 787 936 000 Kč. Zdrojem je ideálně výroční zpráva za rok 2021 uvedená ve sbírce listin.
- Musí obsahovat k.s., v.o.s., a.s. nebo s.r.o., případně rozvinutou podobu těchto zkratk (,akciová společnost“...).

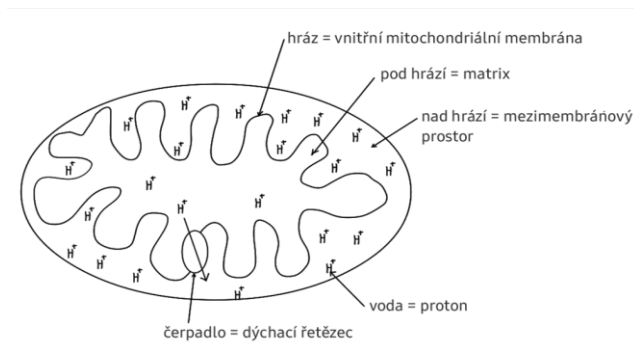
Otázka 1 – 0,25 bodu, 2 – 1 bod, 3 – 2,5 bodu, 4 – 1 bod, 5 – 3,5 bodu, 6 – 1 bod, 7 – 0,5 bodu, 8 – 1 bod, 9 – 0,25 bodu, Celkem 11 bodů.

Úloha č. 5: Buněčná elektrárna a jak ji rozbít

(14 bodů)

Autoři: Martin Nováček a Ivana Holpuchová

1. Univerzální formou energie je pro buňky molekula ATP.
2. Ano, existují i živé buňky bez mitochondrií, a to červené krvinky. ATP získávají pomocí glykolýzy za anaerobních podmínek.
3. Palivem Krebsova cyklu je acetyl-koenzym A. Produkuje ho řada reakcí, například glykolýza, respektive na ni navazující pyruvátdehydrogenázová reakce, beta-oxidace, katabolismus aminokyselin, katabolismus ketoláték, katabolismus ethanolu...
4. Beta-oxidace připomíná sledem reakcí druhou polovinu Krebsova cyklu (směrem od sukcinátu po oxalacetát postupně probíhá dehydrogenace, hydratace dvojně vazby a dehydrogenace vazby k nově vzniklé OH skupině.) Pyruvátdehydrogenázová reakce je krok analogický k alfa-ketoglutarátdehydrogenázové reakci. Přestože je dehydrogenace v biochemii velmi běžný typ reakce, pyruvát- a alfa-ketoglutarátdehydrogenázová reakce jsou procesy výrazně složitější. Jsou zprostředkovány enzymovými komplexy, které využívají spoustu různých kofaktorů odvozených od některých vitamínů skupiny B. Proto je zde též uvádíme jako významné analogické procesy.
5. Parou jsou v této analogii elektrony (o vysoké energii); parovody potom elektronové transportéry (NAD, FAD).
- 6.

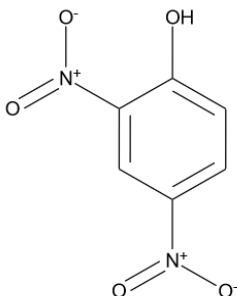


7. Elektrony jsou použity na redukci molekuly kyslíku, která následně reaguje s H_3O^+ ionty za vzniku vody. Aby byl k dispozici kyslík jako finální příjemce těchto elektronů, je nutný jeho přísun z vnějšího prostředí dýcháním. Dýcháním se samozřejmě zbavujeme i CO_2 a regulace dýchání se ve zdravém organismu

odvíjí právě od jeho koncentrace, ale jsou i případy, kdy převažuje regulace podle koncentrace kyslíku.

8. Dýchací řetězec se skládá z komplexu I, II, III a IV, koenzymu Q (též zvaného ubichinol/ubichinon) a cytochromu c. Komplexy I, III a IV jsou transmembránové proteiny, které transportují protony z matrix do mezimembránového prostoru, a zvyšují tak elektrochemický gradient. energii na to získávají postupným průchodem elektronů dýchacím řetězcem. Komplex II je sice také transmembránový protein, ale jeho účel vyžaduje pouze, aby byl v kontaktu s matrix. Jde totiž o enzym Krebsova cyklu sukcinátdehydrogenázu, který redukcí sukcinátu získává elektrony do dýchacího řetězce (mimořádně, kofaktor FAD, který je uváděn jako příjemce elektronů, není ve skutečnosti samostatná látka, ale pevná součást tohoto enzymu). Koenzym Q přenáší elektrony od komplexu I nebo II ke komplexu III, je nepolární, a proto „plave“ rozpuštěn v membráně. Cytochrom c přenáší elektrony od komplexu III ke komplexu IV, je polární, rozpuštěný v matrix a asociovaný s vnitřním listem vnitřní mitochondriální membrány.
9. ATP syntáza nápadně připomíná turbínu/turbogenerátor. Transmembránová část obsahuje rotor, který se fyzicky otáčí, když přes něj po elektrochemickém gradientu „protékají“ protony. Jak se rotor otáčí, mění se konformace druhé oblasti, která je v matrix mitochondrie, a ta připojuje fosfát na ADP za vzniku ATP. „Voda“, tedy protony, dodávají do systému energii tím, že uvolňují svou energii původně uloženou do elektrochemického gradientu.
10. Potenciální energie (elektrochemický gradient) protonů (H^+ gradient) přechází na kinetickou energii protonů a ATP syntázy, která se ukládá jako potenciální (vazebná) energie připojeného fosfátu.
11. Kromě zmíněné funkce univerzálního energetického substrátu slouží například jako prekurzor intracelulární signalizační molekuly cAMP, zdroj fosfátu pro fosforylace všeho druhu (například regulační), jako mononukleotid pro syntézu RNA, ...
12. Fluoroacetát je skrze fluoroacetyl-CoA metabolizován na fluorocitrát, který v kroku citrát→isocitrát inhibuje enzym akonitázu.
13. A: Amygdalin, X: HCN, Y: glukóza, Z: benzaldehyd

14.

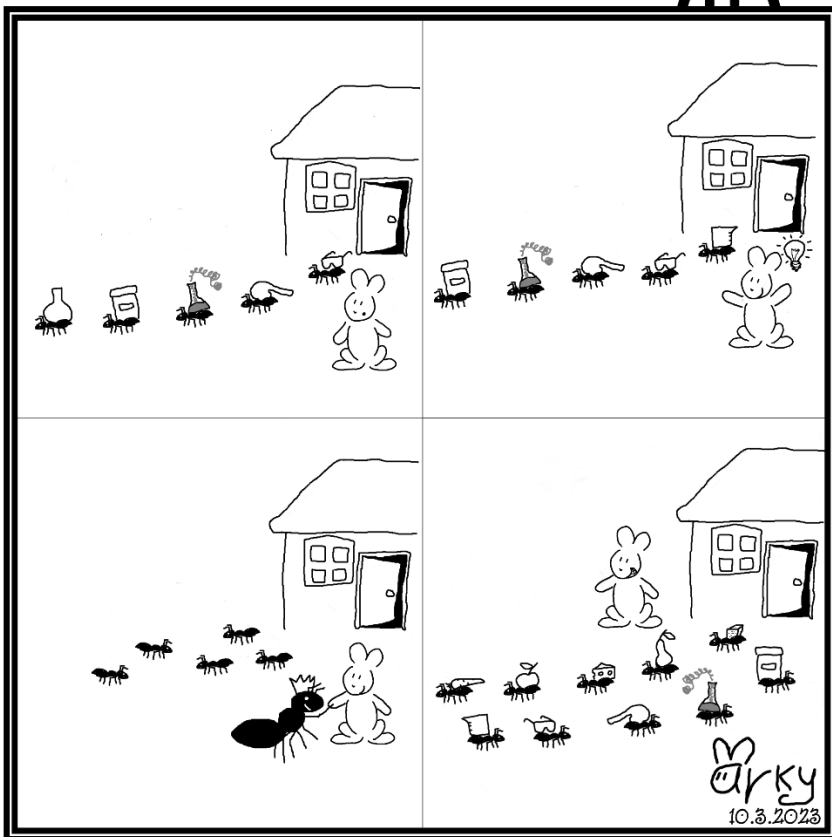


Dinitrofenol je malý a obsahuje nepolární benzenové jádro (volně prochází membránami), $-O-H$ vazba oslabená záporným mezomerním efektem NO_2 skupin jednoduše uvolňuje a opět váže H^+ . V mezimembránovém prostoru interaguje $-O^-$ s H^+ (vzhledem k velké koncentraci protonů je pravděpodobnost navázání vysoká), v matrix jej vypouští (koncentrace protonů je zde nízká, pravděpodobnost zpětného navázání malá).

15. Energie se nikam neukládá, uvolňuje se tedy ve formě tepla, což vede k hypertermii. Dalším důvodem hypertermie je nedostatkem ATP způsobená iontová nerovnováha vedoucí k svalovým kontrakcím. Dalším projevem je masivní hubnutí. Buňce se nedostává ATP, což stimuluje procesy směřující k tvorbě ATP, která ale neprobíhá, protože je oxidativní fosforylace odprážená (*uncoupled*) od dýchacího řetězce. Tento cyklus vede k masivnímu spalování energetických substrátů a následně selhání energeticky náročných tkání.

Otázka 1 – 0,5 bodu, 2 – 1 bod, 3 – 1 bod, 4 – 0,75 bodu, 5 – 1 bod, 6 – 1,5 bodu, 7 – 0,75 bodu, 8 – 0,75 bod, 9 – 1 bod, 10 – 1 bod, 11 – 0,5 bodu, 12 – 1 bod, 13 – 1 bod, 14 – 1,25 bodu, 15 – 1 bod. Celkem 14 bodů.

Zajíček chemik



Arky
10.3.2023