



Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 22 (2023/2024)

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 nebezpečnostvím 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 22. 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 *Kovy v organické chemii*, který pro Vás bude psát Jan Hrubeš. V neposlední řadě můžete v každé brožurce sledovat osudy skutečně neohroženého komiksového hrdiny, a sice Zajíčka chemika.

KSICHT pořádá 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 možnost získat motivační stipendium¹.

¹ Více informací najdete na webových stránkách KSICHTu.

**Termín pro odeslání řešení 2. série:
1. 1. 2024**

Elektronicky (PDF)	Papírově
http://ksicht.natur.cuni.cz/ odeslani-resi	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 pět 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 i 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 následující stránce elektronicky nebo papírově (rozhoduje čas na serveru KSICHTu či datum poštovního razítka).

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

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

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

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

Pomozte šetřit české lesy a KSICHTÍ peníze!

Jelikož od založení KSICHTu doba pokročila, mnozí z Vás nyní čtete tento text v elektronické podobě. Má to jistě své mouchy, ale přesto se domníváme, že část z Vás pro zjevné výhody digitálního formátu PDF papírovou brožurku už vůbec nevyužívá. Pokud se bez papírové brožurky objednete, zvolte prosím ve svém profilu na KSICHTím webu možnost „Nechci dostávat papírové brožurky poštou“. Pomůžete tím šetřit české lesy a KSICHTÍ peníze. Řešení, nálepky a ostatní náležitosti Vám budou chodit poštou i nadále. Děkujeme!

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 **Wikipedii** 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 číslic 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, třídít 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. Více viz další strana brožurky o využívání AI.

⁵ Tzv. kalkulátorový syndrom: „Svět byl stvořen za 6,9999999999942 dní.“ Toto není ani správná, ani přesná hodnota.

Úvodníček

Milé KSICHTřačky, milí KSICHTřáci,

naše druhá letošní série je tu v ikonickém čase mezi Dušičkami a adventem, a jako taková přináší hned celou řadu přemýšlivých témat.

Její první příspěvek se vrací právě k Dušičkám, a ještě víc snad k jejich angloamerické době Halloweenu. Představte si, že Vám v tomto čase došly v New Yorku sladkosti – nezoufejte, úloha *Molekuly vs. mimina* Vám poradí, jak se zbavit i jejich konzumentů.

Domýšlet podobné zápasy do detailů může být poněkud drastické; lépe bude si z této první úlohy odnést jen její zajímavé kombinace chemických struktur. Abychom se nadobro vyhnuli postranním úmyslům, je hned druhá úloha přímo *Andělská*. Nemusíte se ale bát nudně bílých barokních andělíčků, pro její ústřední organochemické téma je podstatný nejen například fialový, ale dokonce ultrafialový anděl!

Hezkou náplní dlouhých podzimních večerů mohou být také například výpravné příběhy Johna R. R. Tolkiena. I v nich vystupují andělé, takzvaní Maiar, a některé z nich potkáte i ve třetí části této brožurky. Ale pozor, *Do Mordoru cesta dlouhá*, a kromě nadšení pro kulturu můžete na této cestě potřebovat i obecnou chemii!

Přichází čas na praktičtější úkoly! Abychom ale dodrželi přemýšlivý námět této brožurky, půjde o praktické téma s alchymistickým příběhem, *Proteinovou alchymii*. Velkým alchymistickým finále je kreativní příprava oblíbené potraviny, a aby byly zřejmé její jednotlivé kroky, předchází jim průřez proteinovou biochemií.

Po obecné, organické a biologické chemii schází k úplnému chemickému přehledu snad už jenom matematika. Zájemce o obecnou chemii a její principy *Matematika kyselin a zásad* určitě potěší, pro řešitele v maturitním ročníku půjde navíc o ochutnávku začátků studia snad jakékoliv chemické vysoké školy.

Jak se výběr témat podařil, se opět dozvíme z Vašich řešení. V případě jakýchkoliv potíží se na nás ale neváhejte obracet kdykoliv dříve! Dotazy na autory úloh směřujte na jmeno.prijmeni@ksicht.natur.cuni.cz, technické nebo jiné obecné otázky zodpovíme na ksicht@natur.cuni.cz.

V neposlední řadě děkujeme prvním letošním výletníkům za milé setkání, a na všechny z Vás se těšíme na dalších výletech a soustředěních!

Do té doby za všechny KSICHTy zdraví
Vojta Laitl

Seriál: Kovy v organické chemii

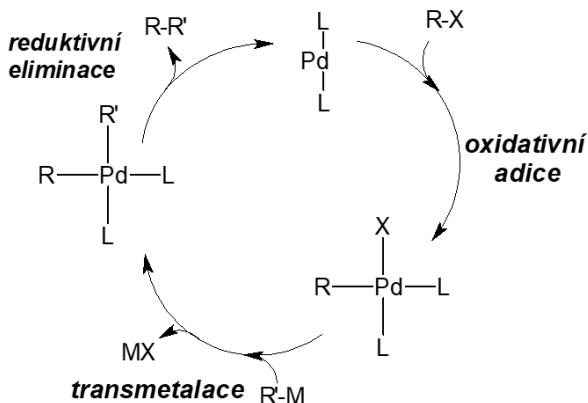
Autoři: Jan Hrubeš a Jan Bartáček

2. díl: Katalýza přechodnými kovy a cross-coupling reakce

V minulém dílu seriálu jsme si představili organokovy a nejjednodušší reakce, které se v organokovové chemii objevily od dob jejího vzniku. Zdaleka nejdůležitější jsou ale reakce s přechodnými kovy – o tom ostatně svědčí i to, kolik za ně bylo uděleno Nobelových cen.

Cross-coupling reakce jsou obecně reakce, při kterých se tvoří vazba uhlík–uhlík mezi dvěma různými substráty. Pro jejich katalýzu se nejčastěji používá palladium v oxidačním stavu 0 a jeho sloučeniny. Reakce tohoto typu byly poprvé popsány v sedmdesátých letech 20. století.

Obecný mechanismus těchto reakcí zahrnuje oxidativní adici na palladium v oxidačním stavu 0 za vzniku čtvercového komplexu s dvojmocným palladiem jako centrálním atomem, transmetalaci a reaktivní eliminaci produktu. Katalytický cyklus zjednodušeně znázorňuje následující schéma:



Tyto reakce jsou často velmi citlivé na přítomnost kyslíku a vody, a je s nimi tedy třeba pracovat za speciálních podmínek, ve zvláštních aparaturách umožňujících vyloučení vlhkosti a práci v inertní atmosféře (N_2 , Ar).

Jedním z případů cross-couplingu jsou reakce, kde dochází ke spojování halogenderivátu a sloučeniny nesoucí násobnou vazbu. Limitací všech těchto metod je hybridizace atomu uhlíku, který je připojen k halogenu. Tyto reakce jsou výborně zvládnuté pro uhlíky s sp^2 a sp hybridizací, u sp^3 hybridizovaného halogenderivátu se couplings obecně daří méně. Trendem u všech zmíněných reakcí je, že nejrychleji reagují jodderiváty R-I , bromderiváty R-Br pak reagují

méně, avšak stále uspokojivě ochotně. Chlorderiváty R–Cl jsou v tomto typu reakcí velmi málo reaktivní a vyžadují speciální aktivaci. Fluorderiváty R–F nereagují vůbec.

Podle druhu reagujícího substrátu pojmenováváme reakce po jejich objevitelích. **Heckova reakce** je obecně coupling mezi arylhalogenidem a alkenem. **Negishiho reakce** umožnila spojovat alkylyzinečnaté sloučeniny a alkenylhalogenidy – pomocí Negishiho reakce je možné tvořit i vazby mezi sp^2 a sp^3 uhlíky. **Migitova-Stilleho-Kosugiho reakce** se využívá na tvorbu vazby mezi dvěma sp^2 uhlíky či mezi sp^2 a allylovým uhlíkem. Prekurzorem jsou halogenderiváty a cínité organokovové sloučeniny.

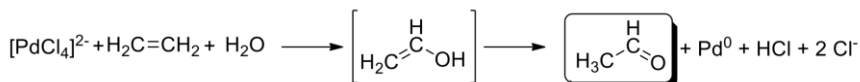
Sonogashirova reakce, spojující terminální alkyny a aryl- nebo alkenylhalogenidy se od ostatních cross-coupling reakcí odlišuje použitím měďných sloučenin jako kokatalyzátorů. Sonogashira zde podstatným způsobem navázal na práci svých kolegů, kteří ovšem bez použití měďných sloučenin jako kokatalyzátoru museli reakci provádět za poměrně vysokých teplot (100 °C). Sonogashirou navržený systém ovšem dosahoval excelentních výtěžků za mírných reakčních podmínek.

Suzukiho-Miyauraova reakce byla objevena v roce 1979. Jde o reakci boronových kyselin s arylhalogenidy za vzniku odpovídajících bifenyľů. Tato reakce je výhodná i v tom, že může probíhat i ve směsi protických polárních rozpouštědel, jako je například vodný ethanol. Možnost provádět reakce ve vodném prostředí je pro chemiky obzvláště přitažlivá a environmentálně přívětivá.

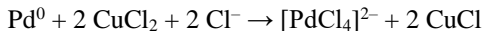
Průmyslové použití katalýzy přechodnými kovy

Wackerův proces – výroba acetaldehydu

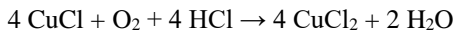
Velmi významnou průmyslovou metodou využívající organokovové komplexy Pd je Wackerův proces. Jde o reakci alkenů s vodou a průmyslově se využívá zejména pro výrobu acetaldehydu (ethanal) z ethenu. Reakce probíhá tak, že tetrachloropalladnan reaguje s vodou a ethylenem a dojde k zavedení OH skupiny z vody na ethen. Vzniklý enol je nestabilní a okamžitě se přesmykuje na aldehyd.



Problémem však je, že dochází k redukci palladia ze stavu 2+ na 0; reakce by tak spotřebovala veškeré Pd^{2+} a dále již neprobíhala. Bylo by tedy potřeba používat stechiometrické množství Pd, což by bylo velmi nákladné a zároveň ekologicky nepřijatelné. Do reakční směsi je proto přidáván CuCl_2 , který dokáže oxidovat Pd^0 zpět na Pd^{2+} .



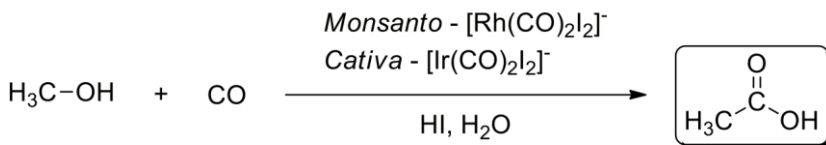
Výhodou je že CuCl je možné zpětně oxidovat na CuCl₂ pomocí kyslíku, a není tak nutné provádět reakci se stechiometrickým množstvím CuCl₂.



V tomto katalytickém systému je tedy možné oxidovat ethen na acetaldehyd pouze kyslíkem, kterého je ve vzduchu dostatek.

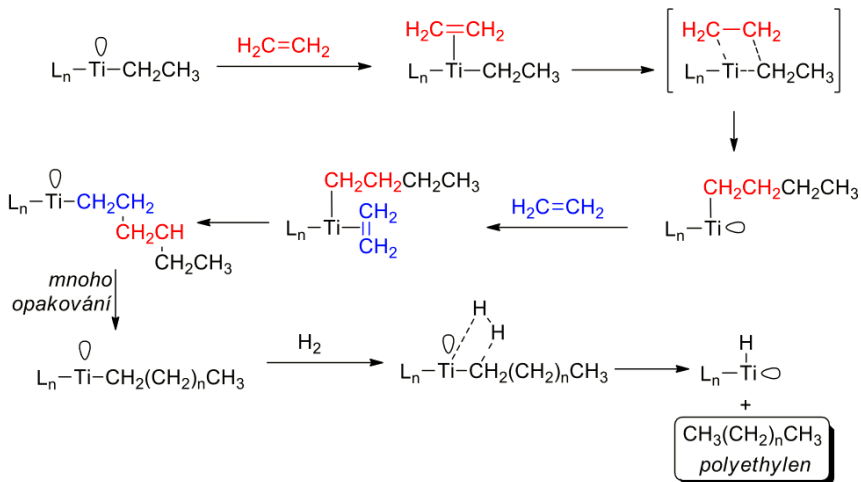
Monsanto/Cativa proces – výroba kyseliny octové

Kyselina octová je velmi významná chemikálie, která je pro potravinářské účely připravována biotechnologicky. Pro přípravu technické kyseliny octové se využívá katalytické karbonylace methanolu pomocí oxidu uhelnatého. Tuto reakci je možné realizovat buď na komplexech rhodia (Monsanto proces, diiodido-dikarbonylrhodnan) nebo iridia (Cativa proces, diiodido-dikarbonyliridnan) za přítomnosti jodovodíku a vody.



Zieglerova-Nattova polymerace

Jednou z nejvýznamnějších moderních aplikací je využití komplexu titanu a dalších kovů k přípravě polymerů. Pro přiblížení procesu, který je ilustrován na následujícím schématu, si představme atom titanu, který je koordinován dalšími ligandy, odlišnými pro jednotlivé procesy (obecný zápis n nespecifikovaných ligandů = L_n). K centrálnímu kovu (Ti) se na volné koordinační místo koordinuje alken (ethen) a dochází k inserci do již existující vazby Ti–C(sp³), která je nestálá. Tímto procesem dochází k prodloužení řetězce a vzniká nové volné koordinační místo, kam je koordinována další molekula alkenu. Ta opět podléhá inserci a dochází tak k dalšímu narůstání řetězce. Tento proces se mnohonásobně opakuje až do momentu, kdy je řízeně ukončen přidáním vodíku do směsi (plynný H₂) a dojde k uvolnění výsledného polymeru (polyethylen).



Nyní už toho víte hodně o katalýze přechodnými kovy. V následujícím díle se zaměříme na to, jak lze řídit reakci, aby proběhla přesně na místech, kde chceme.

Zadání úloh 2. série 21. ročníku KSICHTu**Úloha č. 1: Molekuly vs. mimina****(7 bodů)**

Autor: Jakub Krieger

Medvědi vs. mimina jsou ujetou pártou hrou schovanou v ještě ujetější chlupaté krabici. Čeká Vás v ní sešívání hrůzostrašných medvědů (a jiné havěti) pojídajících otravná mimina.

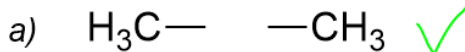
Sešijte dohromady Štiku ozbrojenou nožem a burritem nebo Lenchoda s chapadly v děsivých kočičích bačkůrkách. Dejte svým výtvorům zbraně, čepice a končetiny a připravte je na nevyhnutelný masakr šklebáků.



Pokud jste se právě zděšili a pojali podezření, že jste otevřeli špatnou stránku, tak vězte, že ne. Jde o KSICHTÍ úlohu, které vznikla, když se mi do ruky dostala hra *Medvědi vs. mimina*.

Aby všechny další úlohy dávaly alespoň trochu smysl, bude Vaším prvním a nesoutěžním úkolem podívat se na videonávod k této hře⁶.

Z názvu úlohy je již asi jasné, co bude Vaším úkolem. Místo sešívání monster budete spojovat části molekul. To má ovšem svá pravidla. Tak, jako musí u částí monster pasovat stehy, musí u molekuly pasovat vazby (obrázek 1).



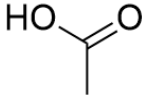



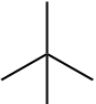




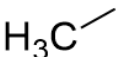
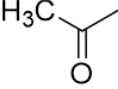
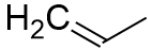






Obrázek 1. Pravidla pro spojování částí molekul. Konce bez funkčních skupin představují místa spojení.

- Co by se stalo, kdybychom chtěli spojit uhlíky způsobem *b)*? Nakreslete 3D obrázek vzniklé částice CH_3CH_2 a do něj na správné místo zakreslete jeden orbital nesoucí nepárový elektron. Vysvětlete, proč by nemohla vzniknout více než jednoduchá vazba.

Nyní už víte, jak se molekuly správně spojují. Asi Vás nyní zajímá, z čeho je budete skládat. Nabídku všech použitelných částí molekul najdete v tabulce 1.

⁶ https://youtu.be/_zoRz3x5RLw. Pro účely této úlohy stačí čas 0:00–1:50.

Tabulka 1. Nabídka částí molekul. Konce bez funkčních skupin představují místa spojení.

Hlava				
Tělo				
Levá ruka				
Pravá ruka				
Nohy				

2. Sestavte z částí v tabulce 1 čtyři molekuly podle nápovědy níže. Každou část z tabulky 1 použijte *právě jednou*. Ke každému písmenu **A**, **B**, **C** a **D** nakreslete strukturní vzorec molekuly a pojmenujte ji.

Pozor, stejně jako ve hře nebude mít každá molekula nohy.

A: Desinfekční prostředek působící méně vysoušivě než ethanol.

B: Potenciální karcinogen ve spáleném jídle.

C: Látka, kterou najdete třeba v láku na okurky.

D: Kyselina zmíněná v jedné z dalších úloh v 2. sérii.

Abyste měli v následujících úlohách z čeho vybírat, postavíme si ještě jednu sadu molekul.

3. Sestavte z částí v tabulce 1 další čtyři molekuly podle nápovědy níže. Každou část použijte *právě jednou*. Ke každému písmenu **E**, **F**, **G** a **H** nakreslete strukturní vzorec molekuly a pojmenujte ji.

E: Molekula se středem symetrie.

F: Aminokyselina, kterou kóduje kodon s cytosinem na druhém místě (chiralitu aminokyselin zanedbejte).

G: Požití této látky může vést k oslepnutí.

H: Základ pro polymery, které se využívají v jednom typu uměleckých barev, které jsou voděodolné a neotírají se.

4. Napište názvy čtyř molekul (nejen molekul **A–H**), které lze z nabídky poskládat více způsoby.

Ted', když jste si postavili dostatek molekul, můžete je konečně vyslat do boje proti miminům. Jak ale vybrat, které molekuly jsou ty nejlepší? V toxikologii se pro vyhodnocení nebezpečnosti používá mimo jiné konceptů *hazard* a *riziko*. Hazard je nebezpečí, které hrozí při kontaktu s danou látkou. Riziko je hazard přenásobený pravděpodobností, že s danou látkou do kontaktu přijdete.

5. Vyberte z látek **A–H** tři látky, které podle Vás představují pro mimina největší *hazard*. Při hodnocení uvažuje, jakou škodu by napáchalo, kdybyste lidskému miminu dali lahvičku s danou látkou v čistém stavu. Svoji volbu stručně okomentujte.

Poznámka: Pokud se budete opírat o kvantitativní vědecká data, uveďte zdroje.

6. Vyberte z látek **A–H** tři látky, které podle Vás představují pro mimina největší *riziko*. Při hodnocení uvažujte, jakou škodu miminu způsobí daná látka při expozici z jeho přirozeného prostředí. Stručně okomentujte hazard dané látky (pokud jste tak neučinili v úkolu 5) i pravděpodobnost styku s touto látkou.

Pokud jste vybrali své molekuly, je na čase mimina vyprovokovat!

7. Vytvořte vlastní kartu mimina (s obrázkem a názvem). Inspirujte se kartami z původní hry⁷, zapojte svou fantazii a chemickou tematiku. Své výtvořky vložte do složky na adrese <https://bit.ly/KSICHT-mimina> ve formátu png o velikosti maximálně 2 MB. Soubor pojmenujte „Příjmení_Jméno_Mimino“.

Nejlepší výtvořky budou zveřejněny v řešení.

⁷ Karty mimin z původní hry a ukázky monster jsou na <https://bit.ly/karty-ze-hry>.

Úloha č. 2: Andělská

(7 bodů)

Autor: Tomáš Heger



Náhle při nich stál anděl Páně a sláva Páně se rozzářila kolem nich. Zmocnila se jich veliká bázeň. Anděl jim řekl: „Nebojte se, hle, zvěstuji vám velikou radost, která bude pro všechny lid. Dnes se vám narodil Spasitel, Kristus Pán, v městě Davidově.“

(Lukáš 2:9–12)

S blížícím se časem vánočním se i KSICHT podívá na námi dosud opomíjenou tematiku – anděly a jejich vliv na chemii. Možná si říkáte, jaký obor chemie by toto mohl proboha využít! Ukážeme si, že hned několik z nich!

Nejprve musíme zjistit, jaké vlastně mají andělé fyzikálně-chemické vlastnosti.

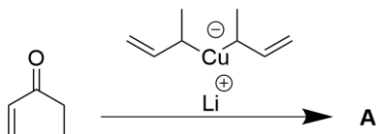
1. Typická představa anděla je taková, že se étericky vznáší na obláčku, aniž by vykonával jakýkoliv aktivní pohyb. To naznačuje, že hustota jeho těla je menší než hustota vzduchu. Z jakých plynů by se tedy mohl anděl skládat? Jmenujte alespoň 5 chemicky čistých látek.
2. Andělé jsou ale také mnohdy popisováni jako bytosti z čistého světla. Jako takové můžeme samozřejmě mít anděly s různou vlnovou délkou. Přiřaďte k následujícím vlnovým délkám andělů reakce, které by onen anděl mohl katalyzovat.

Vlnová délka anděla	Reakce
ultrafialový anděl	degradace riboflavinu
fialový anděl	biologická redukce plastochinonu
modrý anděl	vibrace C=O vazby v acetonu
zelený anděl	chlorace alkanů
červený anděl	fotopolymerizace vinylů
infračervený anděl	konverze merocyaninu na spirooxazin

Andělé bývají často členěni dle různých hierarchií, ale za nejvýznamnější z nich bývají obecně považováni archandělé. Dle katolické tradice existují tři archandělé – Michael, Gabriel a Rafael. Jistě není náhoda, že dva z těchto andělů se dají spojit s nějakou organickou reakcí!

V organice se Michaelova adice oficiálně jmenuje podle Arthura Michaela, a dochází při ní k nukleofilní 1,4-adici. Existuje celá řada činidel, která umí takovou reakci katalyzovat, a celá řada akceptorů, na kterých lze tento ne zcela intuitivní typ adice pozorovat.

3. a) Jaké podmínky musí splňovat molekula, aby byla považována za Michaelův akceptor (molekulu, která v této reakci přijímá elektrony od nukleofilu)?
 b) Jaká látka **A** vznikne při následující Michaelově adici?



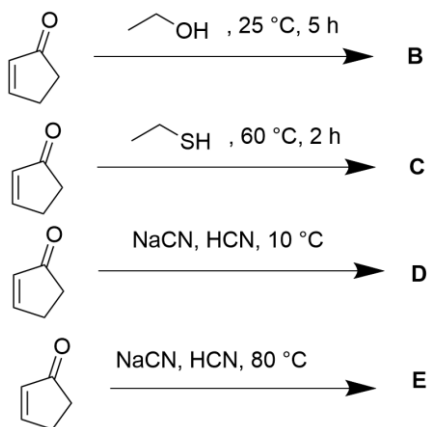
Obrázek 1: Michaelova adice s neznámým produktem **A**

Michaelova adice je velmi záluždná. Vzhledem k povaze akceptorů je totiž vždy v kompetici s 1,2-adicí, a občas je náročnější určit, která z nich probíhá. Vází se s tím také pojmy termodynamická a kinetická kontrola reakce.

4. Vysvětlete vlastními slovy, co je to termodynamické řízení (kontrola) reakce. Jak a proč se liší od řízení kinetického?

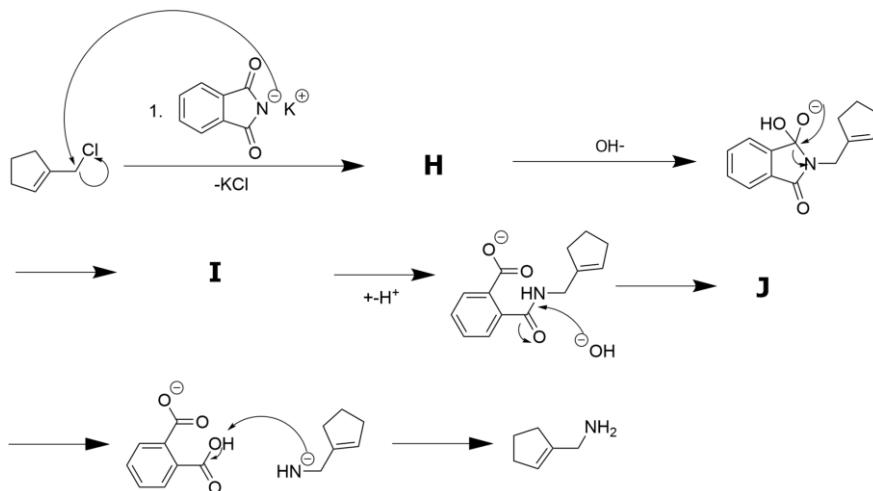
1,4-adice a 1,2-adice se dají také kontrolovat použitím tvrdých nebo měkkých nukleofilů (více se o tvrdosti a měkkosti v chemickém stylu dočtete například zde: tiny.cc/hsab).

5. a) Který z výše zmíněných typů adicí bude spíše probíhat při použití tvrdého nukleofilu, a který spíše při použití měkkého nukleofilu?
 b) Na základě reakčních podmínek a reaktantů v následujícím schématu určete produkty **B**, **C**, **D** a **E**.



Obrázek 2: Reakční schémata několika Michaelových adičních reakcí

Druhou reakcí, která nás v této úloze bude zajímat, je Gabrielova syntéza. I v tomto případě za jejím jménem nestojí archanděl, ale „pouhý“ chemik–objevitel Siegmund Gabriel. Tato syntéza využívá primární alkylhalogenid a ftalimidovou sůl k syntéze primárních aminů, jak ukazuje následující příklad (reakce probíhá samozřejmě i s jinými alkylhalogenidy):



Obrázek 3: Schéma Gabrielovy syntézy vycházející ze chloromethylcyclopent-2-enu

6. a) Doplňte do mechanismu Gabrielovy syntézy z obrázku 3 kroky **H**, **I** a **J** (včetně zahnutých šipek).
- b) Alternativní postup pro Gabrielovu syntézu používá v druhém kroku jiné činidlo místo hydroxidové báze. Jaké to je činidlo a jaký je vedlejší produkt při takové reakci? Proč se toto alternativní činidlo používá?

Na závěr si položme jednu filozofickou otázku, která se s anděly pojí nejspíše již od 18. století a stále nemá odpověď. Třeba ji příchod chemika do diskuze pomůže rozřešit!

7. Kolik andělů může tančit na špendlíkové hlavičce? Jakákoliv logická úvaha se cení, zejména pokud využije principů fyziky nebo chemie.

Úloha č. 3: Do Mordoru cesta dlouhá

(11 bodů)

Autor: Vít Novotný

Člověk (natož pak hobit) se ani nenaděje a čajovým dýchánkem začne nečekané dobrodružství, které je nadto začátkem cest ještě mnohem delších. Bilbovu cestu plnou dobrodružných chemických výpočtů popsala v 19. KSICHT⁸ ročníku⁸ Karolína Fárníková. Časové přešli a nám dnes nezbývá než čtveřici hobitích přátel doprovodit na dalším dílu velké cesty.

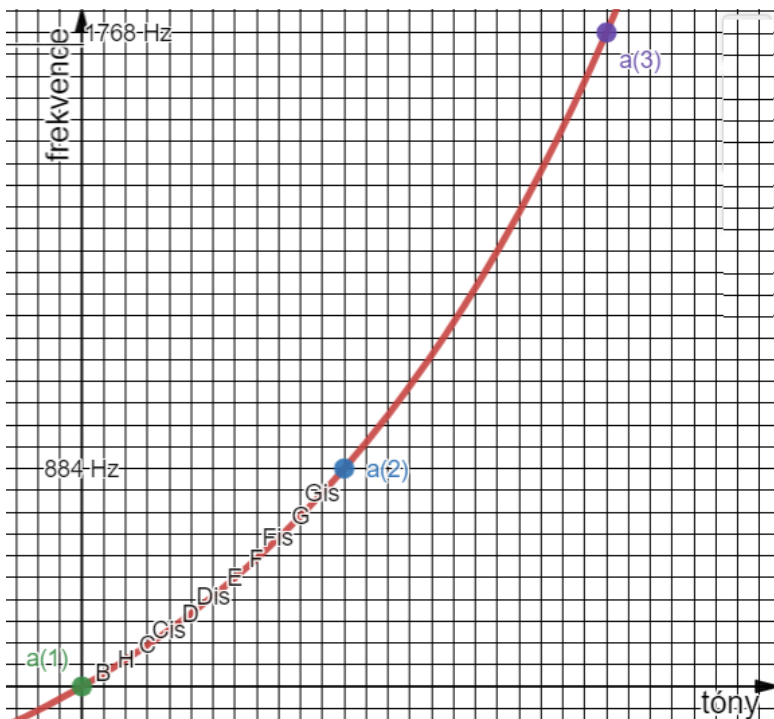


- a) I Frodově cestě předcházela dýchánek, a to *dlouho očekávaný*. Kolikáté narozeniny Bilbo slavil?
 - I na tomto dýchánku byl důležitou postavou Gandalf ve svém vysokém klobouku. Klobouky značí váženost, moudrost či jiné typické vlastnosti svého nositele. S opačným významem asociuje klobouk přísloví *mad as a hatter*. Toxicita jakého prvku pravděpodobně stojí za tímto přirovnáním? Jeho chlorid se používal k výrobě plsti, a právě kloboučníkům se tak mohl hromadit v nervové tkáni a způsobovat její degradaci. Jaký nese tento chlorid triviální název? Jmenujte jiný chlorid téhož prvku, který je díky nižší rozpustnosti méně jedovatý a používal se dříve jako laxativum.
 - Který autor (mimo jiné matematik) archetyp bláznivého kloboučníka použil?

Od dýchánku uplynulo ještě mnoho let, než se první společníci Prstenu vypravili k Roklince. Již na začátku své cesty se setkali se služebníky Nepřítele: do morku kostí jim proniklo volání nazgûlû – hrůza doposud nepoznaná. Jednou z možností, jak si poradit s neznámým, je nalézt vhodnou analogii ke známému. Zkusme toho přístupu využít i tváří v tvář Jezdcům (nejednoduchým zákonitostem hudební teorie nebo jiným *nečekaným* výzvám, s nimiž se chemik na své *cestě* setká).

- Orchestra ladí podle tónu a^1 (komorní A), který nechť má frekvenci 442 Hz. Interval *oktáva* má takovou vlastnost, že horní tón má právě dvojnásobnou frekvenci než spodní.
 - Jakou frekvenci má tón a^2 , který je o oktávu výš než komorní A? Jakou frekvenci má a^3 o oktávu nad a^2 ? Pro ujasnění poslouží následující grafické znázornění:

⁸ <https://ksicht.natur.cuni.cz/media/rocniky/zadani/KSICHT-19-2.pdf>



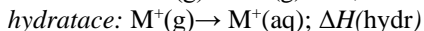
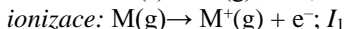
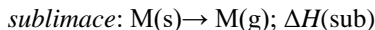
- b) Grafem jakého druhu funkce (lineární, kvadratické, goniometrické, exponenciální, logaritmické...) můžeme frekvence oktáv proložit? Zopakujme, že v každé oktávě má horní tón dvojnásobnou frekvenci tónu spodního. Napište obecný předpis posloupnosti, kde je každý člen $n + 1$ dvojnásobkem n -tého členu. Napište také předpis posloupnosti, kde je člen $n + 12$ dvojnásobkem n -tého členu.
- c) Oktáva je rozdělena na dvanáct půltónů (vyberme ty zvané A, B, H, C, Cis, D, Dis, E, F, Fis, G, Gis; třináctý se nazývá opět A a je o oktávu výš). Považujme rozdělení půltónů za rovnoměrné, tedy podíl frekvencí sousedních půltónů je konstantní. Křik Černého jezdce zní o 35 půltónů výš než komorní A (B je o jeden půltón nad A). Jakým tónem volá a jakou frekvenci? Kdyby tento tón chtěl hudební skladatel použít, nechal by ho zahrát nejspíš cello, violu nebo pikolu?
- d) K čemu v laboratoři může sloužit zařízení zvané sonikátor? Sonikátor využívá ultrazvuk o frekvenci 20 kHz. O kolik celých oktáv výš by minimálně musel nazgůl volat, abychom ho mohli laboratorně použít místo sonikátoru?

- e) Zapišme funkci popisující amplitudu nazgůlova kvilu znějícího nad Větrovem v závislosti na čase t ve tvaru

$$y = A \sin(Bt)$$

Doplňte tvrzení: konstanta A/B souvisí s hlasitostí, proměnná A/B je úměrná frekvenci zvuku.

Nebýt Sarumanovy zrady, určitě by s Gandalfovou pomocí probíhalo putování k Roklince snadněji. Saruman komplikuje cestu i nadále. V nadcházející bitvě zamýšlí využít bouřlivé solvatace alkalických kovů ve vodě. Nejprve ale chce samotné reakci lépe porozumět: solvataci namodeluje procesem podmaňování svých nepřátel. Zatím ví, že rozpuštění kovu M ($2M(s) + 2H_2O(l) \rightarrow H_2(g) + 2M^+(aq) + 2OH^-(aq)$) je možné teoreticky rozložit na sérii tří kroků charakteristických změnou entalpie:



Saruman má k dispozici empirická data získaná při podmaňování lidí. Nejprve kladou odpor a podmaňování trvá déle, potom ale podlehnou a se skřety se mnohdy i spojí. Nyní ověří vzorek dvou hobitů: únosu (sublimace) ani odzbrojení (ionizace) se tak intenzivně nebrání, nicméně ke skřetům (solventu) si vazbu nevytváří.

3. a) Jaká jsou (pro všechny kovy) znaménka $\Delta H(\textit{sub})$, I_1 a $\Delta H(\textit{hydr})$? Svou odpověď jednoduše odůvodněte (například úvahou, kdy dochází k rozbíjení stabilních stavů, kdy ke stabilizaci...). Které dva z uvažovaných kroků teoretického schématu ovlivňují celkovou **reakční rychlost** a proč? Ve svém zdůvodnění uvažte, zda k proběhnutí musí nejprve proběhnout dodání energie. Jak se nazývá veličina I_1 ?
- b) Analyzujte Sarumanův experiment. Doplňte následující tabulku vztahující se ke konkrétním prvkům. Následně vyvoďte obecnější závěr: Je solvatace **kovu s menším atomovým poloměrem a vyšší elektronovou afinitou** relativně analogická podmaňování lidí, nebo hobitů?

	Li	Cs	<i>nabídka</i>
relativně analogický k:			člověk/hobit
$ \Delta H(\textit{sub}) $			79/160 [kJ mol ⁻¹]
$ I_1 $			520/376 [kJ mol ⁻¹]
$ \Delta H(\textit{hydr}) $			277/520 [kJ mol ⁻¹]
reakce s vodou připomíná víc:			výbuch granátu/rozpuštění Celaskonu

- c) Vlastnosti, které v Sarumanově experimentu figurují, souvisejí též s chováním iontů s prvků a jejich acidobazickými vlastnostmi. Pokračujte proto v analýze a vyberte vždy jednu z možností, aby vznikla pravdivá tvrzení: malý iont s velkým nábojem má [vysokou/nízkou] koncentraci náboje. Čím je tedy atom menší, tím má [vyšší/nížší] hodnotu I_1 . Čím vyšší koncentrace náboje, tím vyšší [polarizační síla/polarizovatelnost] kationtu. Ta má za následek [ochotnější/méně ochotný] vznik kovalentních vazeb, a kation se tak ve vodném roztoku vyskytuje spíše ve formě [solvatovaného kationtu/hydroxidu]. Aby tato forma vznikla, musel ion zreagovat s [hydroxidovými anioty/molekulami vody/oxoniovými kationty] přítomnými v rozpouštědle. Oproti neutrální vodě má tak jeho roztok [nižší/nezměněné/vyšší] pH.

Zopakujme, že se provedená úvaha týká iontů samých, nikoliv například jejich hydroxidů.

- d) Jak se jmenuje český vědec působící na ÚOCHB, jehož skupina připravila kovovou vodu jejím kontaktem s alkalickými kovy?

Experiment s hobity se zcela nepodařil, neboť solvent předčasně zoxidoval vinou Aragorna a společníků; potřebná data byla nicméně získána. K proražení Žlebové zdi dá Saruman svým vojákům draslíkovou bombu, která exploduje reakcí s odtékající vodou. Draslík zvolil optimalizací ceny a účinnosti, aktivační energie reakce s vodou bude snížena kouzelnou pochodní.

4. Do kanálu ve Žlebové zdi bude podle plánu utemována nálož. Za zdi se nahromadí dostatek vody pro plné a okamžité zreagování draslíku. K proražení zdi by měla být potřeba energie ekvivalentní $\frac{1}{4}$ t TNT (1 t TNT odpovídá 4,184 GJ).
- a) Reakce proběhne podle rovnice $2K + 2H_2O \rightarrow H_2 + 2KOH$, vzniklý vodík okamžitě exploduje s kyslíkem podle $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$. Předpokládejme, že se produkty po výbuchu dostatečně rychle ochladí o okolní zdi na své standardní stavy. Slučovací entalpie hydroxidu draselného je -425 kJ mol^{-1} ; vody -286 kJ mol^{-1} . Kolik energie se uvolní zreagováním 1 mol draslíku (včetně shoření vodíku)?
- b) Kdyby po výbuchu zůstaly všechny reakční produkty v plynném skupenství, uvolnilo by se do okolí více, nebo méně energie? Své tvrzení zdůvodněte.
- c) Kolik draslíku s přesností na kg ($A_r(K) = 39,0983$) se musí použít na proražení zdi?

- d) Uvolňuje draslík (včetně shoření vodíku) více nebo méně energie než TNT ($M(\text{TNT}) = 227,13 \text{ g mol}^{-1}$) ve vztahu k a) hmotnosti, b) látkovému množství?

Se zvyšující se vulkanickou aktivitou v oblasti *Udûn* zasáhly svahy před Helmovým žlebem kyselá deště, které měly za následek deforestaci.

„(Saruman) has a mind of metal and wheels; and he does not care for growing things, except as far as they serve him for the moment.“

Ve své zaslepenosti proto nemohl počítat se *stromy*, které již tu noc, kdy došlo k bazické explozi, doslova vystoupily do údolí.

5. a) Okyselení jehličnatých lesů bylo výrazným problémem i na území ČR. Uveďte příklad látky a metody aplikace, která se používala pro zvýšení pH lesní půdy.
- b) Legolas naopak považuje kvalitu životního prostředí za tolik důležitou, že hned po výbuchu změřil pH vody pod Zdí. Voda za Zdí se však poskvřnila skřetí krví, a její molekuly se proto začaly rozpadat snadněji, pK_w se snížilo ze 14 na 12. Jaké by bylo neutrální pH v takové vodě za jinak standardních podmínek?
- c) S využitím dané hodnoty $pK_w = 12$ odhadněte koncentraci hydroxidu ve vodě, která se před výbuchem nashromážděna za Zdí, pokud bylo Legolasem změřené $\text{pH} = 7$. Předpokládejte, že se vzniklý hydroxid výbuchem plně disocioval a dostal se do celého objemu vody. Výpočet proveďte se zanedbáním i bez zanedbání autoprotolýzy vody, obě hodnoty porovnejte.

Bitva byla vyhrána. „*Long was the way that fate them bore.*“ My na této cestě Společenstvo doprovodíme zase někdy příště.

Úloha č. 4: Proteinová alchymie

(11 bodů)

Autorka: Lada Švecová

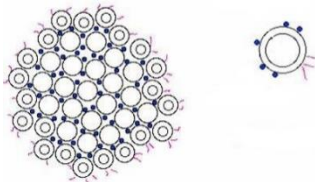


Sýry jsou běžnou a oblíbenou součástí naší stravy. Jak se ale stane, že se z mléka stane sýr? Zjednodušeně asi takto: mléko tepelně ošetříme, zchladíme na kultivační teplotu, přidáme mlékárenské kultury, syřidlo; vzniklou sýřeninu budeme krájet, dohřívát, formovat, solit a necháme ji zrát. Jednotlivé kroky přizpůsobíme typu sýra (případně je úplně vypustíme). A máme sýr – hurá. Nepřijde vám to tak jednoduché? A to jsme se ještě nedostali k tomu, co se vlastně během těchto procesů děje – o tom bude tahle úloha.

Kouzlo mají na svědomí, kromě mnoha dalších procesů, bílkoviny a jejich změny. Mléko obsahuje dva základní typy bílkovin, a to proteiny kaseinové a syrovátkové (sérové). Ty, které tvoří strukturu sýrů, se označují jako kaseiny a patří do skupiny fosfoproteinů.

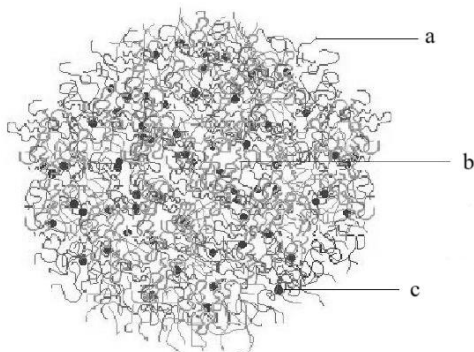
1. Zbytek kyseliny fosforečné se v kaseinech váže na hydroxyskupiny aminokyselin. Nakreslete, jak se fosfát váže na aminokyselinu serin.
2. Existují čtyři základní typy kaseinů: α -s1, α -s2, β a κ . Jedna skupina úplně nesedí do výše uvedené definice, protože nejde o fosfoproteiny. Která? O jaký typ složených bílkovin v tomto případě jde?

Kaseiny se v mléce nachází ve formě submicel, které tvoří micely, jejichž struktura je vidět na obrázku 1. Taková micela průměrně obsahuje 20 000 molekul kaseinu.



Obrázek 1: Micela (vlevo) a submicela (vpravo)

3. Přiřaďte písmena a,b,c z obrázku 2 k číslům, podle toho, co ukazují:
1) α -s1-, α -s2- a β -kaseiny, 2) κ -kasein a 3) klastry fosforečnanu vápenatého.
4. Jaký důsledek má umístění právě složky označené **a** na povrchu micely?
5. Jakým způsobem se jednotlivé submicely spojují?



Obrázek 2: Micela

6. Spočítejte, kolik micel běžně bývá v 1 litru mléka (řádově). Předpokládejte, že mléko obsahuje 3,2 hmot. % bílkovin a kasein tvoří 80 % hmotnosti celkových bílkovin. 1 mol kaseinu má hmotnost řádově 10^8 g. Počítejte s hustotou mléka 1 kg/l.

Na srážení má zásadní vliv pH. Bílkoviny jsou nejméně rozpustné při pH, které odpovídá jejich isoelektrickému bodu (hodnotě pH, při které má bílkovina nulový celkový náboj, je tedy navenek elektroneutrální a nepohybuje se v elektrickém poli). Toho se využívá při takzvaném kyselém srážení mléka.

7. Nakreslete, jak bude vypadat peptid Ala-Thr-Met ve svém isoelektrickém bodě.
8. Jaký je isoelektrický bod kaseinu a jaké je pH mléka?
9. V mlékárenské technologii má na snížení pH na hodnotu odpovídající pI kaseinu hlavní vliv kyselina mléčná. Nakreslete její strukturu. Jak tato kyselina vzniká?

V případě sladkého sýření (používaného při výrobě většiny přírodních sýrů) se kasein sráží pomocí takzvaného syřidla. Ale co to vlastně je? Aktivní složkou syřidel je enzym chymosin, který specificky štěpí molekuly kaseinu. Vznikající polypeptidy ztrácejí své hydrofobní vlastnosti, micely se rozpadají a dochází ke kýženému srážení kaseinu.

10. Jakou kaseinovou frakci (typ kaseinu z otázky 2) konkrétně chymosin štěpí?
11. Na jaké části se tato frakce rozpadne? Která zůstává součástí sýřeniny a která nikoliv?

Vedlejším produktem při výrobě sýrů je syrovátka. Označit ji jako „odpad“ by ovšem bylo velmi nemoudré. Ceněné jsou opět především syrovátkové proteiny. Málokterá bílkovina je totiž tak optimální pro lidskou výživu. Jedním z ukazatelů kvality bílkovin je takzvané aminokyselinové skóre.

12. Vysvětlete, co znamená pojem aminokyselinové skóre bílkoviny. Spočítejte aminokyselinové skóre syrovátkové bílkoviny, kaseinu a celovaječného proteinu. Pro výpočty využijte údaje z tabulky 1.

Poznámka: V současné době už se při hodnocení kvality proteinů sleduje i stravitelnost esenciálních AK (takzvaný systém DIAAS). My si ovšem v tomto případě vystačíme s pouhým hodnocením obsahu těchto AK (takzvaný systém PDCAAS).

Tabulka 1. Složení referenčního proteinu (1. sloupec), syrovátkové bílkoviny (2. sloupec), kaseinu (3. sloupec) a celovaječného proteinu (4. sloupec)

Aminokyselina	g/100 g referenčního proteinu	g/100 g syrovátkové bílkoviny	g/100 g kaseinu	g/100 g celovaječného proteinu
isoleucin	4,0	7,0	5,7	6,6
leucin	7,0	11,8	10,5	8,8
lysin	5,4	9,6	8,2	5,3
methionin + cystein	3,5	5,4	3,3	5,4
fenylalanin + tyrosin	6,1	8,4	11,2	10,0
threonin	4,0	8,5	4,4	4,0
tryptofan	1,0	2,1	1,5	1,6
valin	5,0	7,5	7,0	7,4

Syrovátka se tedy dále využívá, a to hned několika způsoby.

13. Jmenujte alespoň tři (snažte se být co nejkonkrétnější).

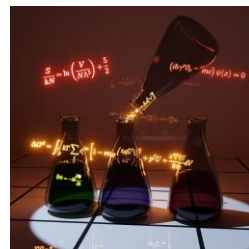
A jelikož v praxi je všechno hned jasnější, zkusíme se nakonec vrátit k postupu z úvodu a podívat se, jak to vypadá ve skutečnosti.

14. Zkuste připravit sýr. V ideálním případě nechte mléko nebo smetanu zakysat mléčnou kulturou (kysaným mléčným výrobkem – jogurtem, zakysanou smetanou, ...) a následně proveďte i sýření pomocí syřidla. Pokud se vám ale do sýření nechce, zkuste připravit alespoň sýr vyráběný pouze pomocí kyselého srážení (typu Lučina). Na email lada.svecova@gmail.com pošlete fotky vašich výrobků a konkrétní postup, který jste použili.

Úloha č. 5: Matematika kyselin a zásad**(12 bodů)**

Autor: Jan Vavřín

Většinu složitějších problémů ve vědě nelze vyřešit přesně, nýbrž je potřeba udělat nějaké zjednodušení – aproximaci. I pokud přesné řešení existuje, může být až moc složité a beztak nám „nic neřekne“. Se správnou aproximací ale zvládneme najít přibližné řešení, jež je mnohem jednodušší na pochopení, ale zároveň nám poskytne i dostatečně správné numerické hodnoty. Hezkou vlastností pak je, že většinou existuje i systematická metoda, jak naše aproximace vylepšovat.



Tato úloha představí dva způsoby aproximace – *Taylorovy řady* a *poruchovou teorii*⁹ – ve velmi zjednodušené podobě. Základním faktem pro pochopení obou metod je, že pokud je x velmi malé číslo, je x^2 ještě mnohem menší a můžeme ho tedy oproti x úplně zanedbat. Například pokud je $x = 0,01$, je $x^2 = 0,0001$. Můžeme tedy s klidem psát, že $x + x^2 \approx x$, a neuděláme při tom chybu větší než 1 %. Podobné uvažování platí i pro x^3 , x^4 , atd.

Přestože se toto uvažování může zdát poněkud abstraktní, je pro chemika nesmírně užitečné. V budoucnu se s ním setkáte velmi často ve fyzikální nebo kvantové chemii, ale my jsme se rozhodli ho představit v mnohem jednodušším kontextu acidobazických rovnováh.

I ten nejjednodušší problém – rozpouštění jednosytné kyseliny (označíme ji genericky jako HA) ve vodě – má několik úskalí. Hraje zde totiž roli několik různých jevů. Ten nejdůležitější je samotná disociace kyseliny na H^+ a A^- ionty. Ale i samotná voda může autoprotolýzou poskytnout ionty H^+ a OH^- . A ionty jsou nabitě částice, takže se elektrostatickými silami různě přitahují a odpuzují, což mění jejich chování v roztoku¹⁰.

Ukazuje se ale, že většinou je jeden z jevů mnohem důležitější než ty ostatní. Ty se pak v našich rovnicích projeví jen jako malá čísla, na která můžeme použít zde představené aproximace. Místo skoro neřešitelného problému tím dostaneme něco, co už lze vyřešit poměrně snadno.

⁹ Anglicky *perturbation theory*, pokud byste chtěli hledat v cizojazyčných zdrojích. I přes nešťastný český název s ní je všechno v pořádku – je to naopak velmi užitečný nástroj, jak při řešení úlohy budete mít šanci zjistit.

¹⁰ To je důležité převážně pro koncentrované roztoky. Technický termín pro tento efekt je, že už nejde o „ideální roztok“ – nelze tedy do rovnovážných konstant prostě dosazovat koncentrace. V úloze to ale úplně zanedbáme.

Taylorovy řady nám umožňují aproximovat libovolnou funkci jednodušším mnohočlenem, alespoň pro hodnoty x dostatečně blízké nule. V této úloze použijeme jen jednu, a to

$$\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 - \dots \quad (1)$$

kteřá platí pro $x \ll 1$ (čtěte: „mnohem menší než“). Většinou nám stačí i jen první dva členy. Např. $\sqrt{1,01} = 1,00499$, zatímco $1 + \frac{1}{2} \cdot 0,01 = 1,005$. Tady by tedy bohatě stačily! Chyba této aproximace je $-1,24 \cdot 10^{-5}$, což je skoro přesně třetí člen řady, $-\frac{1}{8} \cdot 0,01^2$. Třetí člen tedy můžeme chápat i jako chybu, kterou dostaneme, použijeme-li v aproximaci jen první dva členy (a podobně pro člen čtvrtý, pátý atd.).

Naše výrazy budeme občas muset upravit do vhodné podoby. Například na výraz $\sqrt{a+b}$ aproximaci (1) použít nemůžeme, ale vytkneme-li z odmocniny a , získáme výraz $\sqrt{a} \sqrt{1 + \frac{b}{a}}$, na který už se aproximace vztahuje. Nezapomeňte se ale vždycky přesvědčit, že x je opravdu mnohem menší než jedna!

1. V první části úlohy se podíváme na jednodušší případy rozpouštění kyselin ve vodě. Přestože se obvykle pracuje s pH, my budeme raději uvažovat samotnou koncentraci H^+ iontů – bez logaritmu se přeci jen pracuje snadněji.
 - a) Rozpouštíme jednosytnou kyselinu HA ve vodě za vzniku H^+ a A^- iontů. Její disociační konstantu označíme K . Celkovou koncentraci kyseliny označme c . Uvažujte, že v roztoku jsou jen tyto tři částice (konkrétně tedy můžete zanedbat OH^- ionty z autoprotolýzy vody).
 - i) Napište vztah pro rovnovážnou konstantu K pomocí koncentrací H^+ , A^- a HA.
 - ii) Napište rovnici nábojové bilance¹¹. Celkový náboj roztoku je roven nule – koncentrace kationtů a aniontů se tedy musí rovnat.
 - iii) Napište rovnici látkové bilance pro A. Koncentrace A v obou formách dohromady musí být rovna původní koncentraci, c .
 - b) Pomocí těchto rovnic ukažte, že výsledná koncentrace H^+ iontů bude

$$[H^+] = \frac{-K + \sqrt{K^2 + 4Kc}}{2} \quad (2)$$

Rovnice mají ještě jedno řešení. Proč není platné?

¹¹ Občas také uslyšíte název *princip elektroneutrality*.

Víme ale, že pro silné kyseliny platí, že

$$[\text{H}^+] = c \quad (3)$$

– tedy všechna přidaná kyselina je disociovaná. Na první pohled ale není jasné (alespoň mně), že to ze vztahu (2) opravdu vyplývá. Našli jsme sice přesné řešení rovnice, moc intuice nám však neposkytlo. Pomocí Taylorových řad ale platnost vztahu (3) snadno ověříme!

Silné kyseliny jsou takové, které mají $K \gg c$.

- c) Upravte odmocninu v rovnici (2) tak, abyste mohli použít aproximaci (1) – stačí první dva členy – a ukažte, že opravdu dostanete známý vztah pro silné kyseliny.
- d) Použijte i třetí člen v (1), a získejte tak vylepšení vztahu (3).

Kyselina dusičná má $\text{p}K_a = -1,38$. Jak velkou chybu děláme, když vypočteme pH jejího 1M roztoku pomocí vztahu (3)?

- e) Slabé kyseliny mají naopak $K \ll c$. Vysvětlete, proč můžeme zanedbat členy $-K$ a K^2 ve vztahu (2), a ukažte, že jejich zanedbáním dostaneme vzoreček $[\text{H}^+] = \sqrt{Kc}$ – ten můžete znát v jeho zlogaritmovaném tvaru, $\text{pH} = \frac{1}{2}(\text{p}K_a - \log c)$.

Poruchová teorie nám umožňuje řešit rovnice, které umíme vyřešit „skoro“. Například kubickou rovnicí $x^3 - x - 0,01 = 0$ vyřešit neumíme. Vyskytuje se v ní ale jedno číslo znatelně menší než ostatní, 0,01. Označme ho jako ε . Naše rovnice je nyní $x^3 - x - \varepsilon = 0$, kde ε je číslo velmi blízké nule.

Pokud by ε bylo přesně 0, rovnice by měla jednoduché řešení – $x_0 \in \{-1, 0, 1\}$. Naše ε je ale jen „skoro“ 0. Předpokládáme tedy, že řešení naší rovnice budou „skoro“ $-1, 0$ a 1 . Zkusíme najít to řešení, které je blízko k $x_0 = 1$. Poruchová teorie říká, že ho můžeme napsat jako

$$x = x_0 + x_1\varepsilon = 1 + x_1\varepsilon,$$

kde $x_1\varepsilon$ je jakýsi „opravný člen“ a my musíme najít neznámou hodnotu x_1 . Dosadíme-li toto x do naší rovnice, získáme

$$(1 + 3x_1\varepsilon + 3x_1^2\varepsilon^2 + x_1^3\varepsilon^3) - (1 + x_1\varepsilon) - \varepsilon = 0.$$

Pokud je $\varepsilon = 0,01$, je $\varepsilon^2 = 0,0001 \ll \varepsilon$. Členy obsahující ε^2 a vyšší mocniny tedy můžeme s klidem zanedbat. Výsledkem je rovnice

$$3x_1\varepsilon - x_1\varepsilon - \varepsilon = 0,$$

jejíž řešení je $x_1 = \frac{1}{2}$. Všimněte si, že ε se z rovnice vykrátilo. Pokud by se tak nestalo, je to znamením, že jsme někde udělali chybu (nejspíše v hodnotě x_0).

Lepší aproximace pro x tedy je $x = 1 + \frac{\varepsilon}{2} = 1,005$. Podobně můžeme postupovat i pro hodnoty x blízké -1 a 0 , abychom dostali všechna tři řešení. Všimněte si, že naše aproximace poskytne obecný vzoreček platný pro jakékoliv malé ε , nejen $0,01$. To je značná výhoda poruchové teorie oproti numerickému řešení, kde bychom každou hodnotu ε museli uvažovat zvlášť.

Obecně postupujeme tak, že nejprve najdeme v rovnici malý parametr (zde ε). Položíme ho roven nule a najdeme tak přibližné řešení x_0 . Řešení skutečné rovnice pak napíšeme jako $x = x_0 + x_1\varepsilon$, dosadíme ho do ní a zanedbáme členy vyššího řádu v ε . Vyřešíme výslednou rovnici pro x_1 a máme hotovo! Zkuste si v rámci procvičení najít zbylá dvě řešení rovnice $x^3 - x - \varepsilon = 0$. Měla by být $x = -1 + \frac{\varepsilon}{2}$ a $x = -\varepsilon$.

Pro úplnost můžeme zmínit, že je (v principu) jednoduché dostat lepší a lepší aproximace – stačí zahrnout i členy obsahující ε^2 , ε^3 , atd.

2. Přestože jsme získali vzoreček, který platí jak pro slabé, tak pro silné kyseliny, nemáme úplně vyhráno. Zanedbali jsme totiž autoprotolýzu vody, tedy fakt, že i samotné rozpouštědlo může přispět H^+ a OH^- ionty. To může v některých případech být důležité.

a) Aceton je (velmi) slabá kyselina s $pK_a = 19,16$. Vypočítejte pH $0,1M$ roztoku acetonu ve vodě podle vzorečku (2). Dává výsledek smysl? Odhadněte, jaké je pH tohoto roztoku doopravdy.

b) V roztocích velmi slabých kyselin – tedy těch kde $K \ll K_w$ – musíme uvažovat¹² i reakci $H_2O \rightleftharpoons H^+ + OH^-$ s rovnovážnou konstantou $K_w = [H^+][OH^-] = 10^{-14} M^2$. Jak bude vypadat rovnice nábojové bilance nyní?

¹² Pokud jste hodně pozorní, všimlí jste si, že nám tady nevychází jednotky. Správný vztah je totiž $K_c \ll K_w$, ale my uvažujeme koncentrace řádově $1M$, takže to číselně nic nemění.

- c) Vyjadřováním z výše uvedených vztahů (tedy rovnovážných konstant, nábojové a látkové bilance) ukažte, že v této situaci bude koncentrace H^+ řešením rovnice

$$x^3 + Kx^2 - (Kc + K_w)x - KK_w = 0. \quad (4)$$

Rovnici se nepokoušejte řešit!¹³ :-)

- d) Předpokládejme, že K je zanedbatelně malé oproti ostatním veličinám (jako tomu je v případě velmi slabé kyseliny). Ukažte, že přibližným řešením rovnice pak je (očekávaně)

$$x_0 = \sqrt{K_w}. \quad (5)$$

- e) Najděte lepší aproximaci pro $[H^+]$ pomocí poruchové teorie s malým parametrem K .

- i) Dosad'te do rovnice (4) výraz $x = x_0 + x_1K$.
- ii) Zanedbejte vyšší mocniny K a vyřešte pro x_1 .
- iii) Jak velkou chybu ve výpočtu pH uděláme v případě 0,1M roztoku acetonu, když použijeme vzoreček (5)?

- f) Odhadněte pH $10^{-9}M$ HCl. Proč v tomto případě neplatí vztah (3), i když jde o silnou kyselinu?

Využijte aproximaci $K \gg c, K_w$ (jež platí pro silné kyseliny) a zredukujte rovnici (4) na snadno řešitelnou kvadratickou rovnici, která platí pro libovolnou koncentraci HCl. Zde není poruchová teorie potřeba. Dosad'te do této rovnice $c = 10^{-9}M$ a přesvědčte se, že výsledné pH dává smysl.

¹³ Kubické rovnice lze vyřešit s použitím středoškolské matematiky – zkuste si najít *Cardanovy vzorce*. Výsledek je ale tak složitý, že vám toho stejně moc neřekne (a má navíc několik dalších skrytých problémů). Naše aproximace jsou tak mnohem lepší cestou, jak chování acidobazických rovnováh pochopit.

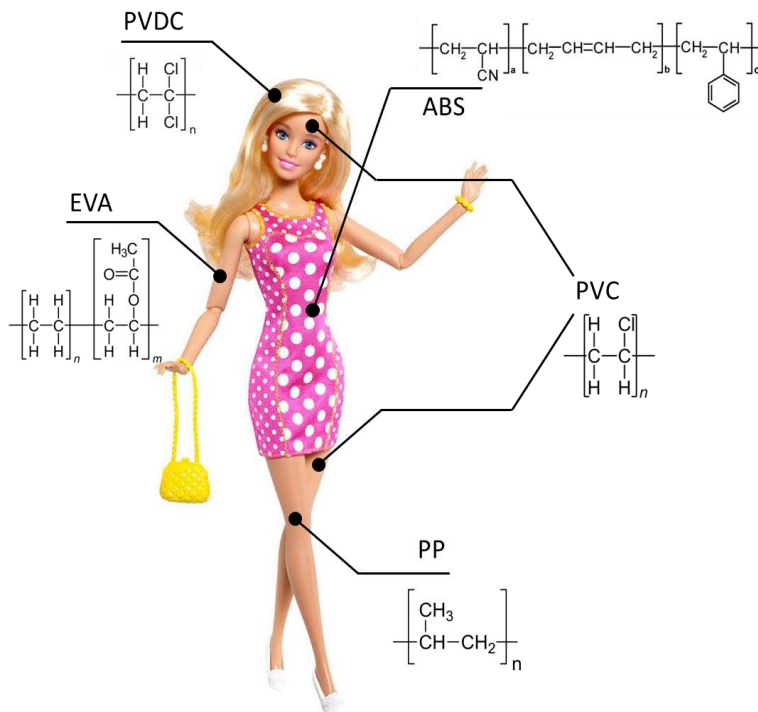
Řešení úloh 1. série 22. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Life in plastic, it's fantastic

(8 bodů)

Autorka: Tatiana Nemirovich

1.



2. Změkčovadla se používají k modifikaci vlastností plastů, aby tak byly měkčí, pružnější a více ohebné.

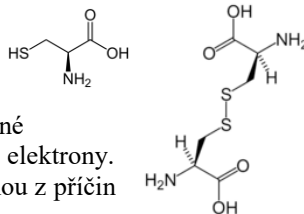
Změkčovadla se vkládají mezi dlouhé polymerové řetězce, a tím zvyšují prostor mezi těmito řetězci a umožňují jim volněji se pohybovat. Díky tomu mohou polymerové řetězce snadněji klouzat proti sobě, což činí plast měkčím a flexibilnějším, aniž by došlo ke změně délky samotných polymerových řetězců.

Typickými příklady změkčovadel můžou být ftaláty (DEHP a DINP), adipáty (DEHA), trimelitáty (TEHTM) a citraneláty.

3. a) Keratin

b) Keratin obsahuje vysoké množství cysteinu.

c) Disulfidové můstky



4. Cystein plní v těle úlohu antioxidantu, což je možné díky atomu síry, který může snadno poskytnout elektrony. Tím působí proti oxidačnímu stresu, který je jednou z příčin ztráty vlasů.

5. Eumelanin, pheomelanin

6. Tato zásaditá činidla otevírají kutikulu vlasových pramenů a vytvářejí vhodné prostředí pro působení oxidačního činidla.

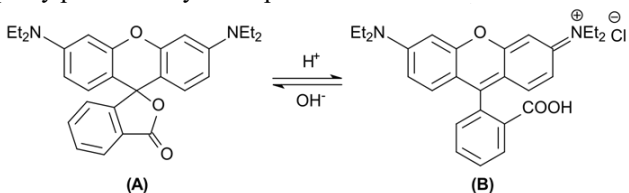
7. Za zásaditých podmínek peroxid vodíku narušuje chemickou strukturu melaninu. V důsledku toho jsou molekuly melaninu fragmentovány, což je činí méně schopnými odrážet barvu.

8. Důvodem je hlavně rozdílná struktura vlasů. Lidské vlasy mají komplexní pórovitou strukturu s kutikulou na povrchu, která může být otevřena alkalickými látkami, aby bylo možné dosáhnout vnitřních vrstev vlasů a změnit barvu. Díky tomu mohou barviva proniknout hlouběji do vlasového vlákna a trvale se vázat na proteinové struktury uvnitř vlasu. Na druhou stranu umělé vlasy, jako jsou ty na Barbie, nemají tuto složitou pórovitou strukturu a jsou často vyrobeny z plastů, jako je polyvinylchlorid nebo polypropylen. Tyto plasty nemají schopnost absorbovat a udržovat barvu stejným způsobem jako lidské vlasy, a proto vyžadují jiná barviva založená na adsorpci na povrchu plastu.

9. Obecně platí, že čím větší máme konjugovaný systém v molekule, k tím větším vlnovým délkám se nám posune poloha absorpčního (neboli fluorescenčního) pásu. Porovnáním struktur látek A a B zjistíme, že látka B má rozsáhlý konjugovaný systém přes celou molekulu, zatímco látka A má konjugovaný systém narušený. Tudíž látka B bude absorbovat a emitovat záření při větších vlnových délkách – ve viditelné oblasti –, zatímco látka A bude mít absorpční pás při nižších vlnových délkách (UV oblast), a proto bude bezbarvá.

Neznámou látkou X je Rhodamin B.

10. Hlavní strukturální změnou mezi látkou A a látkou B je hydrolyza cyklického esteru (neboli laktonu) látky A za vzniku karboxylové funkční skupiny látky B, která typicky probíhá v kyselém prostředí.



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

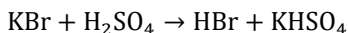
Úloha č. 2: Oppenheimerovská**(9 bodů)**

Autoři: Nikola Bartoňová a Jiří „Herby“ Kysilka

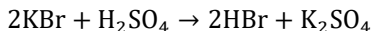
1. rovnice

- $2\text{HCl} + \text{NaClO} \rightarrow \text{Cl}_2 + \text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$ vzniká chlor
- $\text{HCl} + \text{KCN} \rightarrow \text{KCl} + \text{HCN}$ vzniká kyanovodík
- $2\text{KBr} + 2\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{Br}_2 + \text{SO}_2 + \text{K}_2\text{SO}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$ vzniká brom a oxid siřičitý

U této reakce jsme uznávali i varianty:



a

2. $7,49 \text{ mg kg}^{-1} \cdot 80 \text{ kg} = 599,2 \text{ mg} \approx 599 \text{ mg}$

LD = množství látky, která usmrtí určité procento organismu, uvedené v dolním indexu. LD₅₀ tedy značí takovou dávku, při které zemře 50 % pokusných organismů.

3. V kvantové chemii využíváme následující čtyři kvantová čísla:

Hlavní kvantové číslo (n) – určení hlavní energetické hladiny, ve které se elektron nachází, hodnoty; $n = 1, 2, 3 \dots$

Vedlejší kvantové číslo (l) – určení tvaru orbitalu v rámci dané energetické hladiny; hodnoty 0 až $n - 1$

Magnetické kvantové číslo (m_l) – určení prostorové orientace orbitalu, hodnoty $-l \dots 0 \dots +l$

Spinové kvantové číslo (m_s) – popisuje spin elektronu v orbitalu, hodnoty $+\frac{1}{2}$ nebo $-\frac{1}{2}$

4. Aktivační bariéra je:

$$E_A = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot Z^2 e^2 \cdot \left(\frac{1}{r_{\text{jádra}}} - \frac{1}{r_{\text{vazby}}} \right)$$

$$= \frac{1}{4\pi \cdot 8,854 \cdot 10^{-12}} \cdot 7^2 \cdot (1,602 \cdot 10^{-19})^2 \cdot \left(\frac{1}{10^{-15}} - \frac{1}{10^{-10}} \right) \approx 10^{-11} \text{ J}$$

Střední energie atomů plynu je:

$$E_{\text{střední}} = k_B \cdot T$$

$$E_{\text{střední}} = 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 10^7 \approx 10^{-16} \text{ J}$$

$$E_{\text{střední}} < E_A$$

Střední energie atomů je o pět řádů menší než aktivační energie. Proto tato reakce neproběhne.

5. Důvodů, proč je vodíková bomba silnější, než uranová, je hned několik. Z grafu vidíme, že vazebná energie mezi jádry tritia a helia je mnohem větší než v případě uranu a kryptonu s baryem. Množství uvolněné energie proto bude mnohem větší. Vodíková bomba na rozdíl od uranové využívá kromě energie získané štěpením ještě jadernou fúzi, při které se rovněž uvolňuje energie. Pokud bychom porovnali energetický výkon na jednotku hmotnosti, vodíková bomba by byla účinnější z důvodu nízké hmotnosti oproti bombě uranové.
6. Své rozhodnutí odůvodňoval tvrzením, že sklo je pro UV záření nepropustné. UV A však sklem z části prochází. Jakou újmu utrpěl jeho zrakový aparát, nelze posoudit. Můžeme ale s jistotou říct, že jeho rozhodnutí bylo lehkovážné a hazardující se zdravím. V současnosti se ochranné brýle používají i při práci s mnohem slabšími zdroji.
7. Uznávali jsme každou odůvodněnou odpověď. Dorazilo spoustu zajímavých odpovědí, které bylo radost číst. Všem moc děkujeme. Proto jsme se rozhodli podělit se o zajímavé myšlenky i s ostatními KSICHTími řešiteli a zveřejnit dvě úvahy.

Filip Bajaček

Vyvinutí atomové bomby je něčím, čo zmenilo budúcnosť celého sveta. Na prvý pohľad možno človeka, ktorý viedol takýto projekt, považovať za skutočného „ničiteľa svetov“ a možno jeho pričinením zomreli 100-tisíce ľudí, avšak ja osobne by som ho nepovažoval za osobnosť v negatívnom slova zmysle, a to rovno z niekoľkých dôvodov. Po prvé to bol vedec a o jadrovom programe USA priamo nerozhodoval. Stál na čele tímu, ktorý zostrojil atómovú bombu, avšak oni nerozhodovali o jej požití. Po druhé v čase keď bombu zostrojovali, sa predpokladalo, že Nemecko rovnako pracuje na zostrojení jadrovej bomby, teda vyvinutie vlastnej bolo považované za čosi nevyhnutné a rovnako za niečo, čo môže konečne priniesť mier... Sám som videl film Oppenheimer a veľmi sa mi páčil záverečný výrok Oppenheimera, keď si s Einsteinom pripomenuli ich strach o to, že reťazová reakcia by mohla podpáliť atmosféru: „Myslím, že sme to urobili.“ S týmto výrokom sa stotožňujem zostrojenie atómovej bomby pova-

žujem za jeden z nevětších omylů lidstva, které ho v budoucnosti může dovést do záhuby – za příklad toho, ako může být věda využitá aj v neprospech lidstva. Na druhé straně si však myslím, že atomové bomby jako-tak držia v súčasnosti vo svete mier. Pretože každý si je vedomý toho, že jej opätovné použitie by malo fatálne následky, a nik nechce riskovať konflikt, ktorý by k takémuto použitiu mohol vyústiť... Podľa môjho názoru teda Oppenheimer nie je kontroverzná osobnosť – bol to len vedec, ktorý sa snažil využiť svoje poznatky na zostrojenie niečoho revolučného. Za skutočnú skazu tohoto vynálezu mohol niekto iný.

Karolína Pacáková

Upřímně Oppenheimera neberu jako negativní osobu minulosti a pokud něco, tak je mi ho spíše líto, než abych ho odsuzovala. To, že pokud by atomovou bombu nesestrojil on, přišel by s ní někdo jiný je holý fakt. Nemyslím si, že by měl být odsuzován za to, že chtěl vědu posouvat dál a dál za hranice toho, co jim v tu chvíli připadalo možné. Přeci jen, to tak trochu dělá každý vědec, jedině, co Oppenheimer udělal, bylo vybrání si nebezpečného tématu pro to, aby to dokázal. Z morálního hlediska to беру tak, že on bombu nevytvořil proto aby s ní mohl zabíjet ale pro to, aby naopak zabíjení zabránil. Jedině, co udělal blbě bylo to, komu svůj vynález svěřil do rukou (což ovšem na druhou stranu vzhledem k financování projektu taky nešlo úplně ovlivnit).

To, jak změnil svůj názor po bombardování Nagasaki jen ukazuje na to, že jeho morální kompas vůbec nebyl tak zvrácený, jak by si člověk u tvůrce takového vynálezu mohl myslet. To podle mě nakonec pro něj bylo horší, než kdyby byl od začátku ochoten zabíjet. Jeho postoj k použití atomové bomby upřímně nic moc nezměnil (v rámci toho, jak s ní zacházeli) kromě toho, že z něj se najednou kvůli jeho názorům vyhnal, místo oslavovaného vynálezce. Kdyby si stál za svým vynálezem měl by sice krev na ruce, ale zase by žil v mnohem lepším prostředí a kdo ví, co by býval ještě vynalezl. Podle mého názoru nemá krev na ruce Oppenheimer ale ti, kteří atomovou bombu použili a mrzí mě, že on byl jedním z mála lidí, kteří si krev na ruce chtěli přiznat, i když ne tak úplně právem.

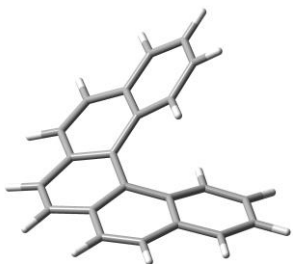
Otázka 1 – 1,5 bodu, 2 – 1 bod, 3 – 1 bod, 4 – 2,5 bodu, 5 – 1,5 bodu, 6 – 1 bod, 7 – 0,5 bodu. Celkem 9 bodů.

Úloha č. 3: Helicénová

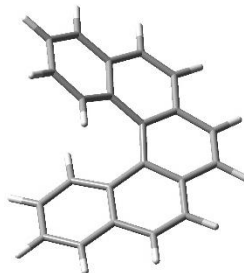
(8 bodov)

Autorka: Emma Tekulová

1. Nebudú planárne kvôli sterickému bráneniu krajných benzénových jadier.
2. Podľa IUPACu je helicén od 5+ benzénových jadier. Teda najmenší je [5]helicén.
3. a)



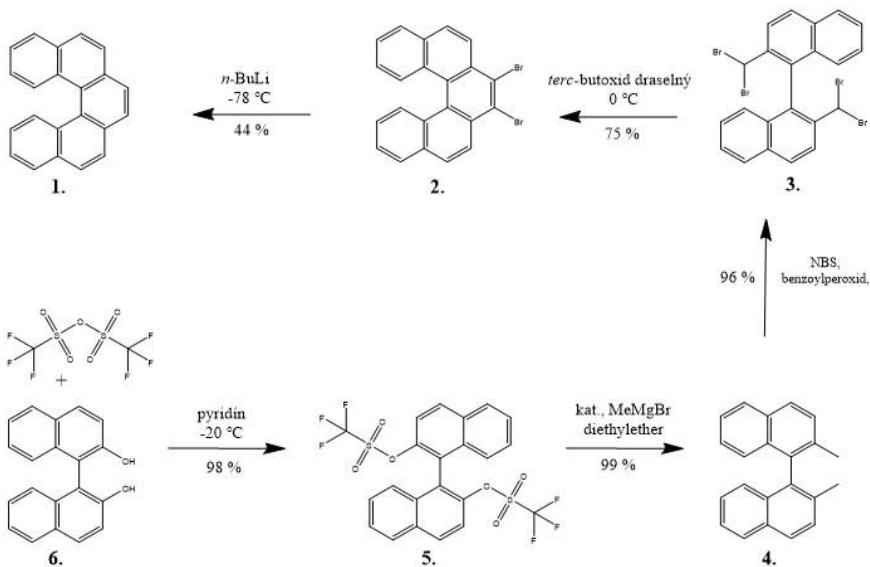
(M)-[5]helicén



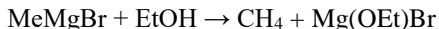
(P)-[5]helicén

b) chiralita helikálna (axiálna), nesúmernosť, asymetrickosť

4.



5. a) Potrebovali sme aprotické rozpúšťadlo. Uhlík v MeMgBr je nukleofilný a teda vie reagovať s protickými rozpúšťadlami.



- b) Tf_2O reaguje s fenolmi za vzniku esterov kyseliny trifluormethansulfonové, čo umožňuje neskoršie energeticky výhodnejšiu nukleofilnú substitúciu.
- c) Je to radikálový iniciátor a reaktantu A budeme potrebovať minimálne 4 ekvivalenty, keďže sa náš produkt brómuje 4 krát.
6. $0,98 \cdot 0,99 \cdot 0,96 \cdot 0,75 \cdot 0,44 \cdot x = 2 \text{ g}$

$$x \approx 6,507 \text{ g}$$

7. a) racemizačná bariéra

- b) HPLC chromatografia na chirálnej stacionárnej fázy

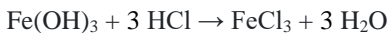
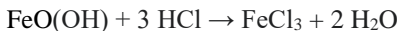
Otázka 1 – 0,5 bodu, 2 – 0,25 bodu, 3 – 1,5 bodu, 4 – 2 body, 5 – 1,75 bodu, 6 – 1 bod, 7a – 0,5 bodu, 7b – 0,5 bodu. Celkom 8 bodov.

Úloha č. 4: Metabolicky aberantní

(12 bodů)

Autorka: Lucie Peterková

1. Látka X je chlorid železitý (FeCl_3). Rez je chemicky $\text{FeO}(\text{OH})$ nebo $\text{Fe}(\text{OH})_3$:



2. a) Neznámou látkou je fenylpyruvát.
b) fenylketonurie
3. a) Vysvětlení tady může být několik. To, že jsou děti světlolase se světlýma očima, může být i z důvodu nedostatku tyrosinu (tvorí se z něj barvivo melanin, které je zodpovědné například za tmavou barvu vlasů) nebo faktu, že jsme v Norsku 😊. Typický zápach po myšince je dán hromaděním degradačních produktů fenylalaninu. Některé tyto produkty jsou fotosenzitivní, proto se u dětí mohla objevit vyrážka.
b) **Fenylketonurie je autozomálně recesivní choroba**, což znamená, že aby se choroba plně projevila, potřebuje jedinec obě alely nesoucí toto onemocnění. Matka je nemocná, má tedy dvě alely nesoucí onemocnění (FF). Otec může být ff (zdravý) nebo Ff (přenašeč). Pravděpodobnost přenosu choroby do další generace je tedy v prvním případě 0 (děti budou přenašeči), ve druhém případě 50 %. Celkově tedy 25 %. c) Pokud bude nemocný otec, výsledek to nijak neovlivní, protože **fenylketonurie je autozomálně recesivní choroba**.
4. Fenylalaninhydroxylasa.
5. Substrátem je fenylalanin, transaminací vzniká fenylpyruvát.
6. U schématu jsou oceňovány technické schopnosti řešitele. Jde o transaminaci. Pro tento typ reakcí je důležitý PLP (pyridoxalfosfát), což je aktivovaný vitamin B6.
7. U von Gierkeho choroby je deficitní glukosa-6-fosfatasa, což je enzym přítomný v játrech. Je důležitý pro uvolňování glukózy ve stavu hladovění. Když k tomuto uvolňování nedochází, organismus se připravuje o důležitou možnost regulace glykemie a může docházet až k hypoglykemickým stavům. U Pompeho choroby je problém ve svalů. Deficitní je lysozomální alfa-glukosidáza. To vede k hromaděním glykogenu zejména v kosterních svalech, myokardu a cévách.

Von Gierkeho chorobu bychom mohli odlišit od DM I. typu podle množství glukózy nebo ketolátek v krvi (u diabetu zpravidla více). Záleží však na tom,

jak moc je DM I. typu kompenzován. Toto je příklad nekompenzovaného diabetu. Uznáváno je jakékoliv jiné logické řešení.

8. a) 18
- b) Například leucinosa (deficitní dehydrogenáza větvených aminokyselin), argininémie (deficitní argináza), citrulinémie I. typu (deficitní argininosukcinátsyntasa), homocystinurie (z deficitu cystathion beta-syntasy nebo methylenetetrahydrofolátreduktasy) a tak dále.
9. Této nemoci nelze předejít (pokud pomineme úpravy genomu plodu). Řešením je pouze dieta, která obsahuje nejmenší nutné množství fenylalaninu (pořád jde o esenciální aminokyselinu).

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

Úloha č. 5: Chemické sudoku

(13 bodů)

Autoři: Rudolf Kvasňovský a Amálie Stoklasová

- I** – Fe (železo), **II** – Cu (měď), **III** – Xe (xenon), **IV** – P (fosfor), **V** – As (arsen), **VI** – Br (brom), **VII** – Al (hliník), **VIII** – N (dusík), **IX** – S (síra)
- A** – P (fosfor), **B** – Al (hliník), **C** – S (síra), **D** – Fe (železo), **E** – Cu (měď), **F** – N (dusík), **G** – As (arsen), **H** – Br (brom), **J** – Xe (xenon)
-

A1 – $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$ – 502,31 g/mol

A2 – PH_3 – 34 g/mol

A3 – NaH_2PO_2 – 87,98 g/mol

A4 – H_3PO_4 – 98 g/mol

A5 – $\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7$ – 177,98 g/mol

A6 – PCl_5 – 208,24 g/mol

A7 – POCl_3 – 153,33 g/mol

A8 – PPh_3 – 262,29 g/mol

A9 – PCl_3 – 137,37 g/mol

C1 – SO_3 – 80,06 g/mol

C2 – SO_2 – 64,06 g/mol

C3 – H_2S – 34,08 g/mol

C4 – H_2SO_4 – 98,08 g/mol

C5 – H_2S_2 – 66,15 g/mol

C6 – $\text{H}_2\text{S}_4\text{O}_6$ – 226,27 g/mol

C7 – SOCl_2 – 118, 97 g/mol

C8 – SF_6 – 146,06 g/mol

C9 – H_2SO_5 – 114,08 g/mol

B1 – Al_2O_3 – 101,96 g/mol

B2 – $\text{Na}_3[\text{AlF}_6]$ – 209,94 g/mol

B3 – $\text{Al}(\text{CH}_3\text{COO})_3$ – 204,11 g/mol

B4 – AlCl_3 – 133,34 g/mol

B5 – AlH_3 – 30,01 g/mol

B6 – LiAlH_4 – 37,95 g/mol

B7 – $\text{Al}(\text{OH})_3$ – 78 g/mol

B8 – $\text{Na}[\text{Al}(\text{OH})_4]$ – 118 g/mol

B9 – DIBAH – 142,22 g/mol

D1 – Fe_2O_3 – 159,69 g/mol

D2 – FeO – 71,84 g/mol

D3 – $\text{Fe}(\text{OH})_2$ – 89,86 g/mol

D4 – $\text{FeC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ – 179,86 g/mol

D5 – K_2FeO_4 – 198,04 g/mol

D6 – FeCl_3 – 162,2 g/mol

D7 – $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ – 368,34 g/mol

D8 – $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ – 329,24 g/mol

D9 – $[\text{Fe}(\text{cp})_2]$ – 186,03 g/mol

E1 – CuFeS_2 – 183,52 g/mol

E2 – CuO – 79,55 g/mol

E3 – Cu_2O – 143,09 g/mol

E4 – $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ – 249,68 g/mol

E5 – $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4(\text{H}_2\text{O})_2](\text{OH})_2$ – 201,71 g/mol

E6 – $\text{Cu}_2(\text{CO}_3)(\text{OH})_2$ – 221,12 g/mol

E7 – Cu_2C_2 – 151,11 g/mol

E8 – CuCl – 99 g/mol

E9 – CuI – 190,45 g/mol

F1 – NH_3 – 17,03 g/mol

F2 – HCN – 27,03 g/mol

F3 – NH_2Cl – 51,48 g/mol

F4 – N_2H_4 – 32,05 g/mol

F5 – NO_2 – 46,01 g/mol

F6 – anilin – 93,13 g/mol

F7 – NaNO_2 – 69 g/mol

F8 – chinolin – 129,16 g/mol

F9 – pyrrol – 67,09 g/mol

G1 – As_2O_3 – 197,84 g/mol

G2 – As_2O_5 – 229,84 g/mol

H1 – LiBrO – 102,84 g/mol

H2 – LiBr – 86,85 g/mol

G3 – As_2S_3 – 246,04 g/mol
G4 – As_4S_4 – 427,95 g/mol
G5 – AsH_3 – 77,95 g/mol
G6 – Lewisit – 207,32 g/mol
G7 – AsCl_3 – 181,28 g/mol
G8 – GaAs – 144,64 g/mol
G9 – H_3AsO_4 – 141,94 g/mol

H3 – KBrO_3 – 167 g/mol
H4 – KBr – 119 g/mol
H5 – BrF_5 – 174,9 g/mol
H6 – KBrO_4 – 183 g/mol
H7 – AgBr – 187,77 g/mol
H8 – CHBr_3 – 252,73 g/mol
H9 – NBS – 177,99 g/mol

J1 – XeF_2 – 169,29 g/mol
J2 – XeF_4 – 207,29 g/mol
J3 – XeF_6 – 245,28 g/mol
J4 – XeO_2 – 163,29 g/mol
J5 – XeO_3 – 179,29 g/mol
J6 – NaHXeO_4 – 219,29 g/mol
J7 – Na_4XeO_6 – 319,25 g/mol
J8 – XeO_4 – 195,29 g/mol
J9 – XeOF_4 – 223,29 g/mol

4.

H9	C4	D3	J3	B8	E4	G1	F4	A3
B3	G5	A7	F9	H6	C2	E8	D7	J1
E1	F2	J5	G6	A5	D6	B4	C8	H7
J7	A6	F8	E7	D1	G2	H5	B7	C5
C6	D9	B5	H3	J8	A4	F3	E3	G8
G4	E9	H2	C9	F5	B6	A2	J9	D4
D2	B1	E6	A1	C3	H8	J6	G9	F6
F7	H1	G3	D8	E5	J2	C7	A8	B2
A9	J4	C1	B9	G7	F1	D5	H4	E2

Bodování: 1 – 0,9 bodu, 2 – 0,9 bodu, 3 – 8,1 bodu, 4 – 3,1 bodu. Celkem 13 bodů.

Zajíček chemik

