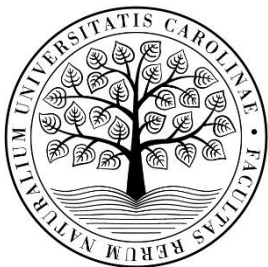




Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 23 (2024/2025)

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 23. 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 kopy 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 *Alotropické modifikace uhlíku*, který pro Vás bude psát Zdeněk Moravec. 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 získat motivační stipendium¹.

¹ Více informací najdete na webových stránkách KSICHTu.

**Termín pro odeslání řešení 2. série:
30. 12. 2024**

Elektronicky (PDF)	Papírově
https://ksicht.natur.cuni.cz/aktualni-rocnik/odevzdat-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 5 úloh k vyřešení. Jsou mezi nimi zábavné hříčky i opravdové oříšky. Pokuste se poradit si s nimi, jak nejlépe umíte, ale pokud je nevyřešíte všechny, nic se nestane. Budeme rádi, když nám pošlete odpovědi byť jen na část úkolů, které úloha obsahuje. Dbejte však, aby Vaše odpovědi byly srozumitelné a aby bylo zřejmé (zejména u výpočtů), jak jste k řešení dospěli.

Každou úlohu vypracujte **samostatně** na list formátu A4, na němž bude uvedeno **Vaše jméno, název a číslo úlohy**. V případě, že posíláte úlohy přes webový formulář (námi preferovaný způsob odeslání), uložte každou úlohu do samostatného souboru PDF². Pro kreslení chemických vzorců doporučujeme používat programy dostupné zdarma: MDL ISIS/Draw, ChemSketch (freeware s povinnou registrací) nebo Chemtool.

Vypracované řešení úlohy odešlete organizátorům nejpozději do data uvedeného na této stránce elektronicky nebo papírově (rozhoduje čas na 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.

Využívání nástrojů umělé inteligence při řešení úloh

Umělá inteligence se stala standardním pracovním nástrojem. Chceme, aby byla přínosem i pro KSICHT. **Domluvme se na následující trojici pravidel**, která nám pomůže udržet KSICHT smysluplný.

1. Uveďte model AI

Zodpovědné použití AI je povolené. Pokud ji použijete, **napište, jaký model a verzi jste využili** (např. GPT-4o...).

2. Uveďte prompt

Uveďte, **jak jste se chatu zeptali**. Autorovi úlohy to umožní zjistit, jak přemýšlíte, a poskytnout Vám zpětnou vazbu. Neodevzdávejte jako odpověď AI generovaný text vzniklý zkopírováním zadání přímo z KSICHTí brožurky, ale cíleně **vyhledávejte konkrétní informace**, se kterými si nevíte rady.

AI Vám může pomoci i jinak: může Vám pomoci s rešerší, pomoci pochopit obtížný článek, zkonzultovat formulaci Vaší odpovědi nebo Vám pomoci dostat se z uzavřeného kruhu myšlenek. Do řešení **neuvádějte nadbytečné informace** a svou odpověď na základě AI výstupu vždy **formulujte vlastními slovy**.

Smyslem formulace řešení vlastními slovy je i to, abyste ze správného AI výstupu (logu) nadbytečné informace vypustili. V tomto ohledu s AI pracujeme jako s libovolnými jinými internetovými nebo knižními zdroji. Nevypisujte nám tedy odstavce, ať už vaše vlastní nebo generované, doufajíc, že si v tom najdeme správnou odpověď. **Předmětem hodnocení bude i sdělnost Vašich řešení**. Autor KSICHTí úlohy není detektiv.

3. Respektujte autory

Autor KSICHTí úlohy není trenér jazykových modelů. Autor je zvědavý na Vaše úvahy, mnohdy jsou pro něj zdrojem inspirace. Přípravám úlohy kromě autora věnuje čas i tým recenzentů, korektorů a dalších editorů. Trefnou autentickou odpovědí **dejte najevo, že si jejich práce vážíte**.

Autor může specifikovat další konkrétní požadavky, jak si při řešení počínat s AI. Respektujte je.

Je-li požadován odkaz na citování zdroje informace, nelze AI použít, protože požadovaný **(primární) zdroj není s pomocí chatu dohledatelný**.

Odhalit, zda byla AI užita, není v současnosti (srpen 2024) možné s jistotou. Trojice pravidel se opírá o důvěru ve Vás. Prosíme, dodržujte je.

Příklad:

Zadání (Heeepšikací úloha, autorka Veronika Vetyšková):

V čem se liší loratadin od desloratadinu a proč má jeden z nich obsah účinné látky 10 mg a druhý jen 5 mg?

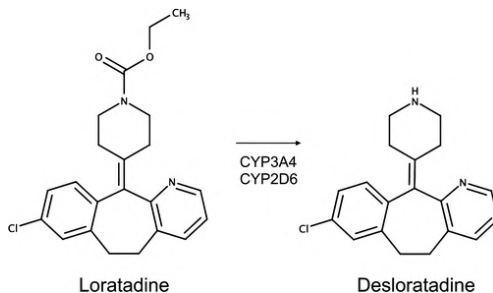
Přijatelná odpověď od řešitele:

Loratadin je proléčivo (prodrug), který se v těle přeměňuje na desloratadin, zatímco desloratadin je již aktivní formou. Proto má loratadin vyšší dávku (10 mg), aby zajistil dostatečnou hladinu aktivní látky, zatímco desloratadin má nižší dávku (5 mg) díky své přímé účinnosti.

(S pomocí GPT-4o, upraveno, zkráceno. Můj prompt: *Jaký je rozdíl mezi loratadinem a desloratadinem? Vysvětli to s ohledem na jejich farmakokinetiku.*)

Autorská odpověď:

Loratadin je takzvané proléčivo, což znamená, že se nepodává ve své aktivní formě. Z loratadinu vzniká desloratadin až metabolicky (vizte obrázek). Z tohoto důvodu je samotný desloratadin podáván v nižších dávkách.



Neakceptovatelná odpověď:

Loratadin a desloratadin jsou oba antihistaminika, která se používají k léčbě alergií, ale mezi nimi existují některé důležité rozdíly:

1. Chemické složení a účinnost:

- **Loratadin** je první generace antihistaminika, která se po podání v těle metabolizuje na desloratadin. To znamená, že loratadin je předlékem (prodrug), který se v játrech přeměňuje na aktivní metabolit, kterým je desloratadin.

- *Desloratadin je aktivní metabolit loratadinu, což znamená, že působí přímo a rychleji než loratadin, protože není nutné, aby se metabolizoval. Desloratadin má tedy přímý antihistaminový účinek.*
2. Dávkování:
- *Loratadin se obvykle podává v dávce 10 mg, protože tato dávka zajišťuje dostatečnou koncentraci účinného metabolitu (desloratadinu) v těle po metabolizaci.*
 - *Desloratadin se podává v dávce 5 mg, protože je účinnější v nižší dávce. Jelikož je již aktivní formou léčiva, není potřeba tak vysoké dávky, jakou by bylo potřeba u loratadinu.*

Tato odpověď obsahuje správné informace. Uznána ale být nemusí. Vzhledem ke stylu psaní v kombinaci se specifickou syntaxí a chybám v gramatice může autor usoudit, že jste formulovaná pravidla porušili, a strhnout body.

V dřívějších letech se bohužel stalo, že autor některé formulace řešení zamítl z důvodu podezření na opisování AI chatu, i když ve skutečnosti byly vlastní prací řešitele. Nekažte proto prosím KSICHT sobě ani ostatním, a při použití AI důsledně dodržujte trojici pravidel.

...já už nevím!

Chcete přemýšlet a učit se? Hledáte lidi, mezi které tím zapadnete? Potom je tu KSICHT pro Vás. Proč? Zkrátka, KSICHT má právě takovou kulturu. Kulturu, ke které patří společná radost z učení se; kulturu, kde jsou upřímnost, pravdivost stejně jako vlastní tvůrčí zápal na vrcholu žebříčku hodnot. Vznikl z ní v podobě, v jaké jsme jej poznali jako řešitelé, dnes už organizátoři. Kulturu nemůžeme vymáhat: chceme ji zachovat, předat dál. Pomozte nám!

- Pište odpovědi, které jsou opravdu Vaše.
- Pište odpovědi, které umíte obhájit.
- Dejte najevo zvědavost.
- Když už náhodou opravdu nevíte, nezachraňujte to bezhlavým generováním textu.

Jako autoři tuto kulturu implicitně vkládáme do KSICHTých brožurek. Přejeme si dostávat to samé od vás, řešitelů. Ve většině případů se tak děje. Neudělejme z KSICHTu soutěž v psaní promptů. Díky!

Úvodníček

Drazí návštěvníci naší KSICHTologické zahrady,

děkujeme vám, že jste se rozhodli navštívit náš objekt. Než se vydáte na obhlídku našich prostor, vyslechněte si prosím toto krátké hlášení. Předně děkujeme, že se k našim obyvatelům, kterým říkáme autoři, chováte s respektem a nekrmíte je ničím nevhodným. To, že řešíte jejich úlohy, je činí šťastnými, a proto doufáme, že v tom spolu s námi budete pokračovat! Nyní ještě představím naše nejnovější přírůstky do zahrady.

Nejblíže ke vchodu si můžete prohlédnout pavilón malých, leč velmi živých stvoření. Velmi ráda si hrají, a zejména mají ráda hlavolamy. Jejich rodu se celkově říká *Hravě rostlinný*, a mezi běžné poddruhy patří třeba křížovky a spojovačky. Díky tomu si můžete všimnout krásných geometrických obrazců na jejich srsti.

Ne všechny naše nové přírůstky podobně hýjí různými obrazci, ale o to krásnější může být to, co se skrývá pod jejich povrchem. Proto se k nim nově řadí také takzvaný *Michací*, což je tvor se speciální láskou ke sladkému a k pečení – no řekněte, není to roztomilé, takhle před Vánoci?

Dále nám dorazil také již dříve slibovaný zástupce druhu, který v naší již zahradě žije, ale byl velmi osamělý. Z jeho samoty ho mají vyléčit *Léčiva v průběhu věku 2*, která jsou stejně hravá jako již přítomný jedinec, ale mají také překvapivou znalost moderní medicíny, díky které se od nich jistě můžete něco přiučit.

Ve čtvrtém výběhu si můžete prohlédnout úlohu, která se možná tváří extrémně kysele, ale má srdce ze zlata a k návštěvníkům je milá. Tato *Acidobazická* záležitost je ve skutečnosti skrz naskrz zásadovým stvořením, a pokud se budete řídit danými pravidly, jistě brzy pochopíte, jak funguje. Tak se k ní hlavně prosím nestavte neutrálně, ale zapojte nadšení.

No a nakonec zlatý hřeb celé prohlídky, který k nám doputoval až z Rakouska. *Grüße aus Wien* je vskutku fascinující svým pohledem na věc (nemluvě o kvalitě, s jakou ovládá cizí jazyky). Navíc čekáme na jeho sourozence, jelikož život o samotě takového úloze nesvědčí. Tímto doufáme, že tyto přírůstky oceníte a užijete si prohlídku!

Za KSICHTí zoo úloh a nápadů

Tom Heger

Seriál: Alotropické modifikace uhlíku

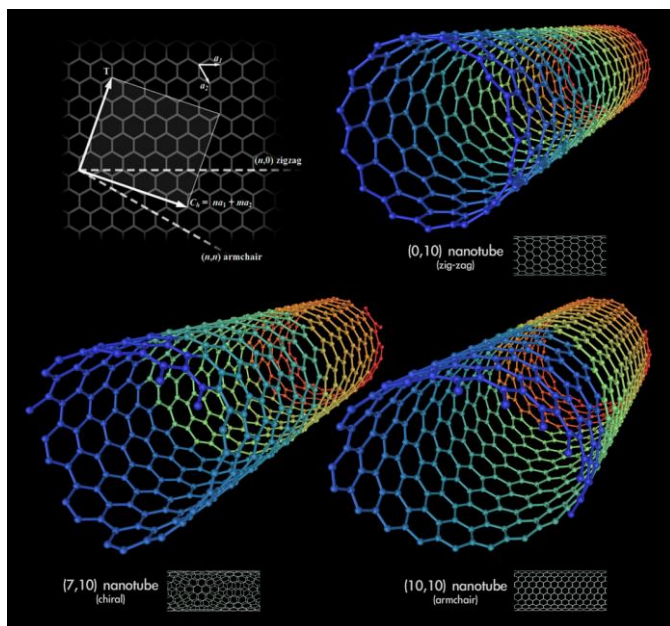
Autor: Zdeněk Moravec

2. díl

V minulém dílu seriálu jsme se zabývali grafitem a diamantem – formami uhlíku, jež zná lidstvo už od nepaměti. Dnes se podíváme na modifikace, které byly popsány v relativně nedávné době – na uhlíkové nanotrubic, fullereny a jejich deriváty.

Uhlíkové nanotrubic

Uhlíkové nanotrubic (CNT, *Carbon NanoTubes*) jsou (jak je z názvu patrné) molekuly válcovitého tvaru, které mají délku výrazně větší než průměr.



Různé tvary uhlíkových nanotrubic. Zdroj: [Mstroeck/Commons](#)

První uhlíkové nanotrubic byly pravděpodobně připraveny už v 50. letech minulého století, například termickým rozkladem *n*-heptanu na železném katalyzátoru při teplotě 1000 °C. První publikovaná syntéza a charakterizace nanotrubic byla ale provedena až v roce 1991.

Dnes známe více metod přípravy. Mezi ty jednodušší patří působení obloukového výboje na uhlíkovou elektrodu [1] nebo využití laserové ablace, tedy působení laserového paprsku na grafitový terč v inertní atmosféře. Pohlcením

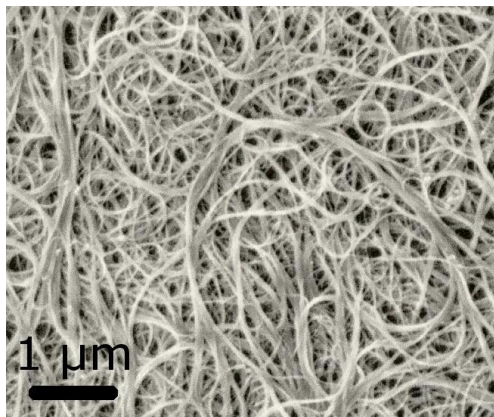
energie laseru dojde k prudkému ohřátí terče a odpaření malého množství grafitu; při následné kondenzaci vznikají nanotrubic [2]. Tato metoda je poměrně účinná a umožňuje přípravu i gramových množství nanotrubic.

Čištění produktu se provádí oxidací nezreagovaného grafitu a amorfního uhlíku (například pomocí dýmavé kyseliny dusičné) a následnou dispergací (rozptýlením v rozpouštědle) nanotrubic pomocí ultrazvukové lázně. Nanotrubic se poté separují s využitím ultracentrifugace (centrifugace při otáčkách nad 60 000 otáček min^{-1}), chromatografických nebo extrakčních metod.

Struktura a vlastnosti nanotrubic

Uhlíkové nanotrubic jsou tvořeny šestičlennými uhlíkovými cykly. Můžeme je rozlišovat podle počtu stěn, které nanotrubicí tvoří. Pomocí laserové ablace získáváme především jedностěnné nanotrubic (SWCNT, *Single-Walled CNT*), zatímco obloukový výboj poskytuje víceštěnné (MWCNT, *Multi-Walled CNT*).

Průměry se pohybují mezi 1 až 100 nm, jedностěnné nanotrubic mají průměry pochopitelně spíše ve spodní části intervalu. Délky se pak pohybují zpravidla v μm .



Snímek shluku nanotrubic z elektronového mikroskopu. Zdroj: [MaterialsScientist/Commons](#)

Uhlíkové nanotrubic mají velmi výjimečné mechanické vlastnosti, například jejich pevnost v tahu je až 20× větší než pro kevlar (velmi pevná vlákna využívaná například pro neprůstřelné vesty). Z tohoto důvodu se s nimi setkáváme ve velkém množství aplikací, mezi nimi například v akumulátorech, kde se využívá jejich dobré elektrické vodivosti a mechanické odolnosti. Lze je proto využít i v takzvané nositelné elektronice (*wearable electronics*), tedy elektronických součástkách určených k nošení přímo na těle nebo v oblečení. Tytéž vlastnosti lze využít i pro

optimalizaci polymerů; můžeme tak získat kompozitní materiály s vysokou pevností a dobrou elektrickou vodivostí, aniž by došlo ke zhoršení vlastností samotného polymeru, například nízké hustoty, nízké viskozity taveniny atd.

Pokud zabrousíme do oblasti sci-fi, mohly by být v budoucnu využity i pro konstrukci takzvaného *vesmírného výtahu*, který poprvé popsal A. C. Clarke v knize Rajske fontány. Jde o výtah, který je schopen dopravit náklad a případně i lidi na oběžnou dráhu Země – jedním z velkých technických problémů je ale výroba dostatečně dlouhého lana, které unese svou váhu (při délce několika desítek tisíc kilometrů) i váhu výtahu a nákladu.

Kromě mechanických vlastností uhlíkových nanotrubic jsou zajímavé i jejich elektrické vlastnosti: v závislosti na struktuře mohou být CNT buď vodivé, nebo polovodivé.

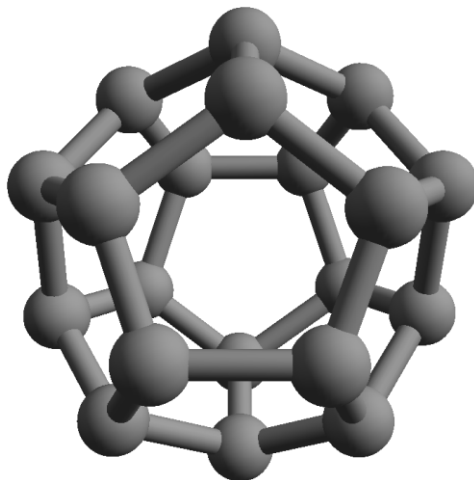
Aplikační možnosti nemají jen samotné CNT, ale i jejich deriváty

- 1) s kovalentní vazbou C–X, kde X je halogen, například C–I,
- 2) s molekulou vloženou dovnitř nanotrubic,
- 3) s nekovalentní interakcí mezi CNT a další molekulou, například polyaromatickou sloučeninou.

Charakterizace nanotrubic je ale poměrně náročná, kromě elektronové mikroskopie (SEM nebo TEM) je možné využít i ^{13}C NMR nebo Ramanovu spektrometrii.

Fullereny

Fullereny jsou kulovité molekuly tvořené pěti a šestičlennými uhlíkovými cykly. Nejstabilnější a nejznámější je takzvaný Buckminsterfulleren, který je tvořen šedesáti atomy uhlíku, C_{60} . Nejmenším fullerenem je dodekaedr (dvanáctistěn) C_{20} , největší fullereny se skládají z více než stovky atomů uhlíku [3].



Struktura fullerenu C_{20} . Zdroj: [Perditax/Commons](#)

Existence fullerenu byla předpovězena na základě teoretických výpočtů už v roce 1965. Prakticky se ale jejich existenci povedlo prokázat až v roce 1985 pomocí hmotnostního spektra sazí získaných laserovým odpařováním uhlíku v atmosféře helia. V tomto spektru byly pozorovány píky o hodnotě m/z odpovídající molekulám C_{60} a C_{70} . Za objev fullerenu pak byla v roce 1996 udělena Nobelova cena za chemii [4].

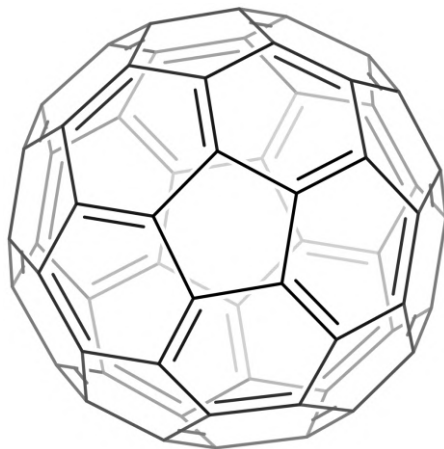
V dnešní době známe tři základní metody přípravy fullerenu:

- 1) působením elektrického oblouku na grafitovou elektrodu v inertním prostředí,
- 2) laserovou ablací grafitu,
- 3) pyrolýzou aromatických uhlovodíků.

Získané saze jsou extrahovány organickými rozpouštědly a následně děleny pomocí chromatografických metod, nejčastěji HPLC (*High-Performance Liquid Chromatography*). Jako mobilní fáze se nejčastěji využívá toluen, xylen nebo sirouhlík (CS_2).

Buckminsterfulleren

Buckminsterfulleren, C_{60} , má strukturu komolého ikosaedru (bodová grupa symetrie I_h). Je nazván po architektovi Buckminsteru Fullerovi, který projektoval kulovité budovy [5]. Jde o nejmenší fullerén, který lze izolovat jako stabilní látku.



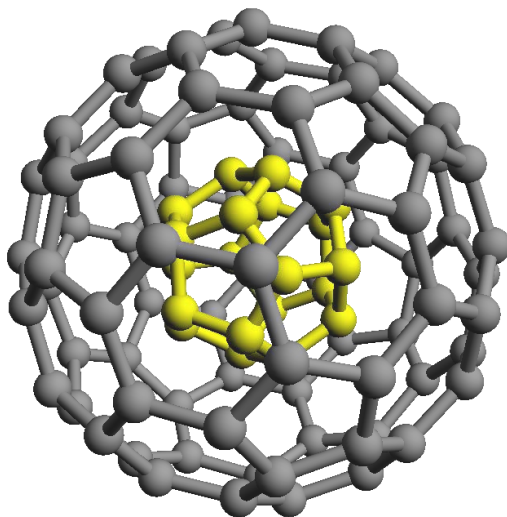
Struktura fullerenu C_{60} . Zdroj: [Benjah-bmm27/Commons](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Benjah-bmm27/C60)

Každý z šedesáti uhlíků fullerenu je vázán ke třem sousedícím atomům. Z 32 stěn je dvacet šestiúhelníkových a dvanáct pětiúhelníkových. Pětičlenné cykly spolu ve struktuře nesousedí, jsou vždy odděleny šestičlenným cyklem (podle takzvaného pravidla IPR – *Isolated Pentagon Rule*) [6]. Všechny uhlíky jsou přesto ekvivalentní, v ^{13}C NMR spektru pozorujeme jediný signál (chemický posun $\delta = +143$ ppm) [7].

Deriváty fullerenu

Fullereny jsou poměrně reaktivní, což způsobilo velký zájem o přípravu jejich derivátů. Rozlišujeme dva typy derivátů, endohedrální (dochází k vložení atomu nebo malé molekuly dovnitř klece fullerenu) a exohedrální (dochází k adici na násobné vazby ve fullerenu).

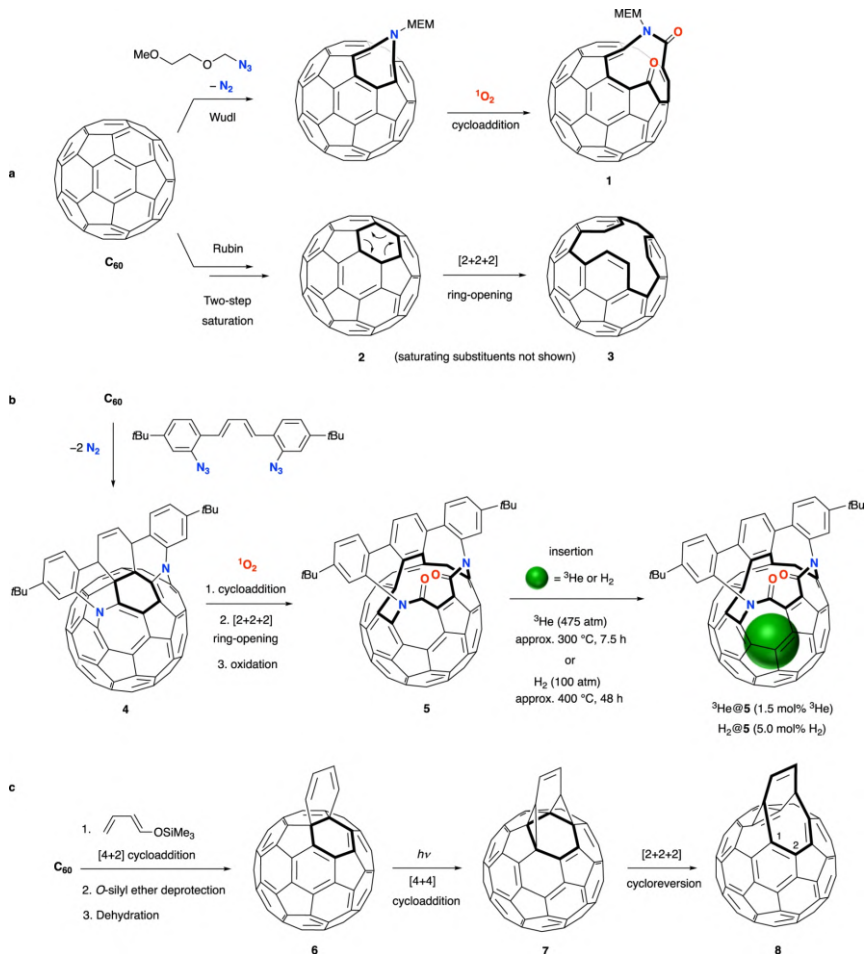
Příprava endohedrálních fullerenu je poměrně komplikovaná. Do fullerenné klece je možné vložit atomy, ale i malé molekuly, například H_2 , H_2O , nebo dokonce C_{20} . Pro vnesení atomu můžeme použít i poměrně drastické metody, například extrémní zvýšení tlaku vlivem exploze. Takto byly připraveny deriváty $He@C_{60}$ a $He_2@C_{60}$ (znak @ se používá k vyjádření toho, že je daný atom (molekula) uvězněna) ve fullerenu [8].



Struktura endohedrálního derivátu $C_{20}@C_{60}$. Zdroj: [Perditax/Commons](#)

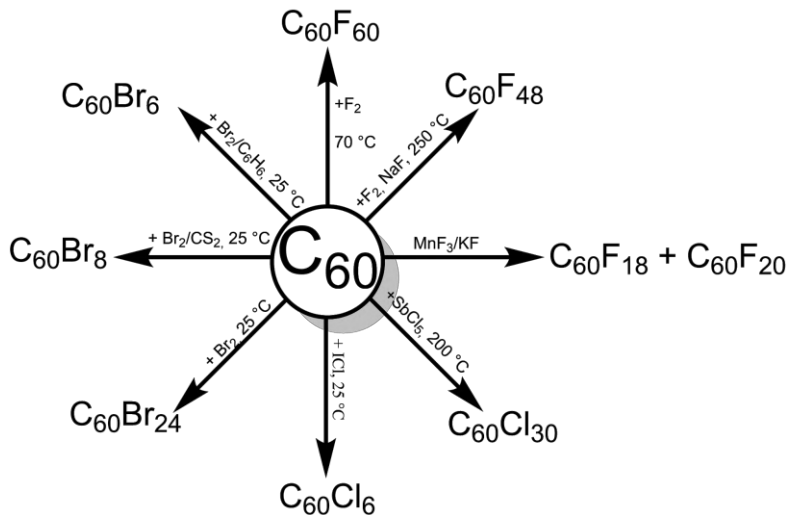
Dnes ale známe i jemnější metody, které jsou srdci chemika bližší. Příkladem je takzvaná molekulární chirurgie (*molecular surgery*), kdy sledem chemických reakcí dojde k otevření klece. Takto upravený fullerén je vystaven působení látky, kterou chceme dostat do vnitřního prostoru, například plynného helia, a poté je jiným sledem reakcí klec uzavřena. Schéma jednoho možného postupu je na obrázku na další straně [9].

Tyto deriváty jsou velmi zajímavé například pro studium spektroskopického chování izolovaných molekul.



Ukázka molekulární chirurgie. Zdroj: [Nature](#)

Exohedrální deriváty vznikají adicí vhodného reaktantu na π -systém fullerenu. Reakcí s plynným fluorem při mírně zvýšené teplotě například dochází po několika dnech k úplné fluoraci skeletu, získáme tedy sloučeninu $C_{60}F_{60}$. Ostatní halogeny jsou větší, a proto není možné, aby se navázaly na sousední uhlíky, získáváme tedy deriváty s menším obsahem halogenu.



Přípravy halogenderivátů C₆₀

Závěr

Druhý díl seriálu byl věnován uhlíkovým nanotrubicím a fullerénům. V předposledním dílu se podíváme na jeden z nejnovějších a velmi populárních allotropů uhlíku – grafen a jeho deriváty.

Literatura

1. Arc discharge method. <https://www.slideshare.net/slideshow/arc-discharge-method/32796591>
2. How to synthesize CNTs by laser ablation method. <https://www.youtube.com/watch?v=cOMl15DKI3k>
3. Valenta, J. Nejkulatější molekula. Vesmír 1997, 76, 65, 1997/2. <https://vesmir.cz/cz/casopis/archiv-casopisu/1997/cislo-2/nejkulatejsi-molekula.html>
4. The Nobel Prize in Chemistry 1996. <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1996/summary/>
5. Buckminster Fuller. https://cs.wikipedia.org/wiki/Buckminster_Fuller
6. Isolated pentagon rule. <https://www.sheffield.ac.uk/kroto/legacy/research/areas/ipr>
7. Fullerenes (An Overview). <https://www.ch.ic.ac.uk/local/projects/unwin/Fullerenes.html>
8. Noble gas endohedral fullerenes. <https://doi.org/10.1039/D0SC02507K>
9. Synthesis of endohedral fullerenes by molecular surgery. <https://doi.org/10.1038/s42004-022-00738-9>

Zadání úloh 2. série 23. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Hravě rostlinná

(11 bodů)

Autorka: Hana Panchártková



Nápad na tuto úlohu vznikl v době sezení a čekání na let někdy kolem 4. hodiny ranní, když už jsem se po celé noci na letišti začala nudit a proklínat se za to, že jsem si nesbalila aspoň křížovku. Tak snad se úloha bude líbit a bez nějakých větších prodlev jdeme na to.

Část I: Fytohormonová křížovka

V 1. části úlohy se podíváme na rostlinné hormony, některé základní a jiné speciálnější. Vaším úkolem bude **doplnit křížovku, vysvětlit slovo, které v ní vznikne a najít spojitost s tématem této úlohy**. Všechny názvy se doplňují v jednotném čísle a 1. pádu. Římské číslice obsazují pouze 1 políčko a X znamená mezeru. Slovo z podotázky a) vždy patří do křížovky a případná podotázka b) se do křížovky nedoplňuje. Odpovědi na podotázky b) zaznamenejte odděleně ve formátu „Číslo b): odpověď“ a odpovědi na otázku týkající se tajenky označte „Tajenka: odpověď“.

1. Naším prvním hledaným hormonem je antagonist k 5. hormonu. Jeho hlavním účelem je regulace tolerance exprese stresových genů.
 - a) Hledaný hormon napište do křížovky.
 - b) Bude se za zvýšené teploty více syntetizovat tento hormon nebo jeho antagonist?
2. Biosyntéza tohoto hormonu vychází z ATP a methioninu. Používá se na dozrávání banánů v dusíkových komorách.
 - a) Jméno hormonu napište do křížovky. Receptor pro tento hormon se nachází na endoplasmatickém retikulu.
 - b) Pro vazbu tohoto hormonu je potřeba určitý anorganický prvek. Uveďte jeho značku a napište, v jaké jiné látce nacházející v rostlinách se vyskytuje.

3. Který rostlinný hormon má potenciální využití v nádorové medicíně, protože indukuje zástavu buněčného cyklu G1? Je také klíčový pro správný vývoj listů a stonků nebo pro růst a ohyb kořenů, ale i pro reakci na podněty z prostředí, například světlo či gravitaci.

a) Napište jeho jméno do křížovky.

4. Tato látka se jmenuje podle českého názvu rostliny, ve které se nachází (není se moc co divit, když ho tu objevili). Je fotosenzitivní, proto se listy, ve kterých se nachází, sbírají při rozbřesku. Reguluje růst, využívá se pro mikropropagaci, zmírnění fyziologických poruch a aklimatizaci tkáňových kultur.

a) Jméno hormonu doplňte do křížovky.

b) Nakreslete jeho chemickou strukturu.

5. Tento hormon sekretují rostliny při stresu a je akcelerátorem růstu výhonků.

a) Jméno hormonu doplňte do křížovky.

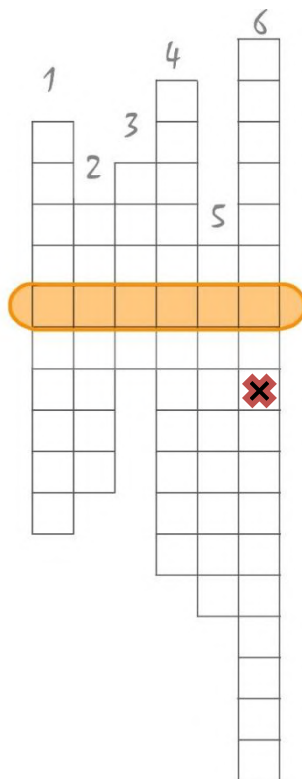
b) Ve kterých 3 částech buňky probíhá biosyntéza tohoto hormonu?

6. Tento hormon chrání rostlinu před okusem housenkami. Ve chvíli, kdy se housenka zakousne, spustí hormon produkci bílkovin, které promění pletivo v nechutnou hmotu. Tento hormon je zároveň antagonistou kyseliny salicylové.

a) Jméno hormonu napište do křížovky.

b) Který živočich umí zvýšit tvorbu kyseliny salicylové, a tím pádem snížit tvorbu našeho hormonu? Uveďte jeho latinské jméno.

Nezapomeňte vyplnit otázky spojené s tajenkou (vysvětlit slovo, které vzniklo v křížovce a najít spojitost s tématem této úlohy).



Část II: Spojovačky

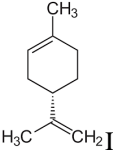
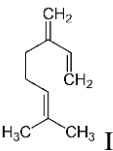
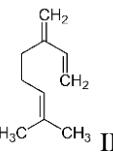
7. a) Spojte název s typem sloučeniny

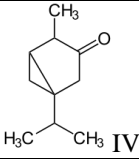
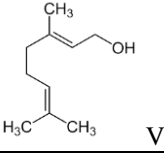
Sloučeniny	Typ sloučeniny
1) Škrob	a) Provitamin
2) Kumarin	b) Rostlinný cukr
3) Salvinorin	c) Prekurzor pro různé antikoagulanty
4) Paklitaxel	d) Léčivo nádorových onemocnění
5) Beta karoten	e) Halucinogen

b) V 1. spojovačce jsme se podívali na látky, které bychom mohli najít v přírodě. Představme si, že jsem se na svých cestách ztratila v lese (což pro mě s mým orientačním smyslem není nic moc neobvyklého) a potřebuji si dát něco k jídlu. Která z látek jmenovaných v tabulce výše mi neublíží? Která mi naopak znesnadní hledání cesty ven a která by mě po požití i menšího množství mohla zabít?

Jedním z možných způsobů, které by mi mohly pomoci zjistit, zda jsou určité rostliny jedlé, je vůně, kterou v rostlině často zajišťují terpeny. Abych si proto byla jistá, zkusím k rostlinám přivonět. Samozřejmě ne všechny mnou vybrané rostliny jsou vhodné k jídlu, ale dají se využít třeba v kosmetice na výrobu domácích hydrolátů a masť. Ty, co se takto dají využít, tedy nasbírám.

8. Nyní se podíváme trochu blíže na rostlinné terpeny. Spojte název s rostlinou a vzorcem. Odpovědi pište ve formátu arabské číslo, římské číslo, písmeno.

Názvy	Vzorce (značte prosím římskými číslicemi)	Vůně
1) geraniol		a) Chmel
2) pinen		b) Růže
3) myrcen		c) Borovice

4) limonen	 <chem>CC12C=CC(=O)C1C2</chem> IV	d) Pelyněk
5) thujon	 <chem>CC12C=CC(=O)C1C2</chem> V	e) Citrusy

Část III: Praktická

A tímto se nám již úloha chýlí ke konci. Doufám, že byla alespoň trochu zajímavá. Ideálně, kdybyste měli čas a chuť mi poskytnout feedback, tak bych byla moc ráda. Klidně mi ho napište úplně na konec zadání. Díky ☺

9. Vaším posledním úkolem bude odpovědět na otázky a připravit, vyzkoušet a ohodnotit jeden z receptů, a to buď:

- artyčokový čaj,
- borůvkový likér, (pro starší 18 let)
- česnekový sirup, nebo
- plněný fenykl.

Artyčokový čaj (z artyčoku kardovéhoho): 2 čajové lžičce sušeného listu přelijeme 250 ml horké vody a necháme 15 minut louhovat, pak přecedíme a pijeme. Správně se má užívat 3× denně a měl by pomáhat při poruchách trávení a léčbě močových cest a ledvin.

Borůvkový likér (1 l borůvkové šťávy, několik hřebíčků, kousek skořice, kůra z půlky pomeranče, 2 g puškvorce, 1 kg cukru krystalu, 1 l lihu 80 %) plně zralé borůvky rozmačkáme a necháme je nakvasit při nižší teplotě. Po nakvašení je vylisujeme. Na 1 l šťávy přidáme několik nahrubo roztlučených hřebíčků, pár kousků nalámané skořice, kůru z půlky pomeranče a 2 g kořene puškvorce. Směs zahřejeme a vaříme 10–15 minut. Vychladlý roztok přecedíme a vylisujeme přes hustší plátýnko. Na 1 l takto upravené šťávy přidáme 500 ml cukerného sirupu, který si připravíme předem svařením 1 kg cukru v 450 ml vody. Sirup vaříme na mírném ohni cca 15 minut. Dále přidáme k borůvkové šťávě se sirupem 1 l konzumního 80% lihu. Promísíme a vzniklý likér necháme ustát. Čirý podíl stáhneme hadičkou a zbytek přefiltrujeme. Obě části slijeme dohromady, likérem naplníme lahve a můžeme konzumovat přímo, lepší ale bývá po uzrání.

Česnekový sirup (8 stroužků česneku, 200 ml medu, 200 ml jablečného octa): rozmačkaný česnek smícháme s octem a medem, krátce rozmixujeme a necháme ve sklenici 5 dní uležet. Užíváme ráno nalačno 2 čajové lžičky rozmíchané ve sklenici vody. Sirup celkově revitalizuje organismus a chrání před onemocněním i v chřipkovém období.

Plněný fenykl (50 g másla, 2ks fenyklu, 160 g cukety, 200 g blatáckého zlata, rajský protlak, 4 lžíce strouhanky, 250 ml zeleninového vývaru, mletý bílý pepř dle chuti): omytý fenykl rozpůlíme a nejjemnější lístky dáme stranou. Půlky vložíme do horkého vývaru a po 10 minutách varu vyjmeme, vydlabeme vnitřky a vyskládáme do zapékací misky. Náplň vyrobíme z najemno nasekaných vařených vnitřků fenyklu, rajčatového protlaku, cukety a kostiček sýra. Vše smícháme, zahustíme strouhankou, opeříme, osolíme a naplníme fenyklové půlky. Poklademe máslem a zapečeme v předehřáté troubě. Na talíři dozdobíme fenyklovými lístky.

- Napište krátkou recenzi o receptu, který jste vyzkoušeli (postačí 1-2 věty, které budou popisovat Váš osobní názor a chuť), a vyfoťte se se svým výtvořem⁶.
- Cynarin je biologicky aktivní látkou v artyčoku a má velmi zajímavou vlastnost. Jakou?
- Jaký flavonoid obsahují borůvky a k čemu je dobrý?
- Jakým způsobem nás látka obsažená v česneku chrání před nemocemi a jak se tato látka jmenuje?
- Jaká látka je zodpovědná za takzvaný ouzo efekt a k čemu jinému by se dala použít v zemědělství?

⁶ Fotky buď vložte do vašeho souboru s řešením této úlohy (pokud odesíláte řešení elektronicky) nebo fotky o maximální velikosti 2 MB s názvem Prijmeni_Jmeno zašlete na email hana.panchartkova@ksicht.natur.cuni.cz. Do předmětu napište Hravě_Rostlinná-Prijmeni_Jmeno.

Úloha č. 2: Míchací

(8 bodů)

Autor: Jakub Krieger

„Vznikání a zanikání nenazývají Řekové správně, neboť žádná věc nevzniká a nezaniká, nýbrž se směšuje a rozlučuje ze jsoucích věcí. Tak by měli správně nazývat vznikání směšováním a zanikání rozlučováním.“ – Anaxagorás, 5. století př. n. l.



Vánoce jsou za dveřmi, a tak se Zajíček Chemik dal do vaření a pečení. Již dříve si všiml dvou podivuhodných případů, které se vymykaly jeho chemické intuici: smícháním dvou tekutin vznikl velmi tuhý krém. Rozhodl se tomu přijít na kloub a vás poprosil o pomoc.

Část A – Sníh

Sníh z vaječného bílku je základem lahodného cukroví, jako jsou pusinky nebo kokosky. Pro Zajíčka byl od malička magií moment, kdy se po ušlehání sněhu otočí mísa vzhůru nohama a sníh se ani nepohne. Pojděte si to nyní sami vyzkoušet.

Recept na vaječný sníh:

Co je potřeba?

- 1 bílek
- 60 g cukru
- mixér (nebo ruční metla a hodně trpělivosti)

Postup:

- Pomocí hrnce s vodou a kulaté misky o podobné šířce vytvořte na plotně horkou vodní lázeň.
- Vezměte jedno vejce a pečlivě oddělte bílek od žloutku. Žloutek si můžete ponechat na část B této úlohy.
- Do misky dejte 1 bílek a rozšlehejte ho mixérem za postupného přidávání 60 g cukru krystal.
- Šlehejte, dokud sníh neztuhne (tedy když se otočí mísa vzhůru nohama, sníh vůbec neteče).

1. Připravte sníh podle receptu výše a upečte z něj nějaké cukroví. Vyfoťte se se svými výtvoři a fotku nám pošlete⁷.

Zajíčka ovšem zajímá odpověď na otázku „Jak to?“. Pomozte mu pochopit, jak příprava takového sněhu funguje.

2. Popište jedním slovem, co se děje s terciární strukturou proteinu při míchání.

Ačkoliv to tak podle receptu nemusí vypadat, sníh je ve skutečnosti směsí tří složek.

3. Jakou třetí ingredienci kromě bílku a cukru do sněhu vmícháváme?
4. Pokuste se schematicky nakreslit, jak vypadá struktura sněhu. Ve schématu popište tři složky této směsi. Jak jsou orientované hydrofilní a lipofilní skupiny proteinů? Jaká je role cukru ve vzniklé struktuře?

Část B – Majonéza

Majonéza je nezbytná ingredience do bramborového salátu, který na štědrovečerním stole nesmí chybět. Byť není problém si majonézu koupit v obchodě, Zajíček by si ji rád udělal hezky po domácku.

Recept na majonézu:

Co je potřeba?

- 1 žloutek
- slunečnicový olej

Postup:

- Oddělený žloutek dejte do hlubokého talíře.
- Za stálého míchání vařečkou velmi pomalu přidávejte olej. Ideální je si udělat malou „loužičku“ oleje na kraji talíře a postupně z ní přimíchávat olej do směsi.
- Míchejte, dokud není majonéza velmi viskózní (tedy když se otočí talíř vzhůru nohama, majonéza vůbec neteče).

5. Připravte majonézu podle receptu výše, vyfoťte se s ní a fotku nám pošlete⁶.

Majonéza zakoupená v obchodě obsahuje ještě další přísady, které jí dodávají chuť. Pro použití na bramborový salát ovšem náš recept postačí a dočutit si ho může každý dle libosti. Nyní však zpět k Zajíčkově předmětu zájmu.

⁷ Fotky o maximální velikosti 2 MB zašlete na email jakub.krieger@ksicht.natur.cuni.cz. Do předmětu napište Míchací_příjmení_jméno.

6. Jakou skupinu látek najdeme ve žloutku hojně, zatímco v bílku se vyskytuje jen v zanedbatelném množství? Proč jsme při výrobě sněhu museli žloutek vyloučit?

Zajíček si všiml jistých podobností mezi postupem výroby sněhu a majonézy. Zaveďme tři pojmy, které nám pomohou tuto podobnost postihnout: *polární fáze*, *nepolární fáze* a *emulgátor*.

7. Vysvětlete stručně tyto tři pojmy a zakreslete je do schematické struktury majonézy.

Pokud bychom do majonézy přidávali olej moc rychle nebo v až moc velkém množství, mohla by se „zdrncnout“.

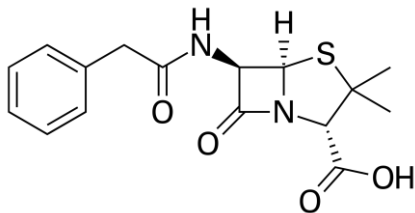
8. Vysvětlete pomocí obrázku z předchozího úkolu, co se děje při „zdrncnutí“. Jak bychom mohli takovou majonézu ještě zachránit? Uveďte alespoň dvě možnosti.

Zajíček Chemik vám děkuje za exkurzi do zákulisí kulinářských kouzel a společně s autorem úlohy vám přeje dobrou chuť. ;)

Úloha č. 3: Léčiva v průběhu věku II

(10 bodů)

Autor: Tadeáš Grabic



Penicilin G, antibiotikum, které zachránilo nejspíše nejvíce životů v lidské historii

Vítejte zpátky ve světě léčiv – látek, které mají účinky na živé organismy. Oproti minulému dílu se více zaměříme na konkrétní léčivé látky, a podíváme se také na příběhy s nimi spojené.

*Tato úloha je, stejně jako předchozí díl, zaměřená na vyhledávání informací a práci s nimi. **Prosím, neuchylujte se ke kopírování odpovědí generovaných umělou inteligencí a odpovídejte stručně. Předem díky!***

V minulém díle jsme se věnovali především dávné historii, ve které byl přístup k léčbě často empirický. V tomto díle se podíváme do bližší historie. Začneme v roce 1921, kdy chemický inženýr Thomas Midgley zjistil, že tetraethylolovo snižuje klepání motoru. Tato látka začala být záhy přidávána do benzínu a postupně se zvyšovala expozice (nejen) lidského organismu olovu.

Co to má společného s léčivou? Na první pohled mnoho ne, ale podíváme-li se na vlastnosti olova, zjistíme, že jde o toxický kov, který v lidském těle způsobuje všemožné potíže. Jednou z nich je snížení intelektu – je prokázáno, že děti exponované olovu mají snížené IQ a větší sklony k agresivitě⁸.

1. Na léčbu otravy olovem je vhodné podávat chelatační činidlo. Jedním z nich je například látka se zkratkou EDTA.
 - a) Co znamená tato zkratka? Uveďte název látky skrývající se pod touto zkratkou.
 - b) Nakreslete vzorec komplexu této látky s chelatovaným olovnatým iontem. Jaký je jeho tvar?
 - c) EDTA není jediné chelatační činidlo. Dohleďte a nakreslete strukturální vzorce dalších 2 chelatačních činidel. Uveďte, na chelataci jakého iontu jsou Vámi vyhledané chelátory vhodné.

⁸Talayero MJ, Robbins CR, Smith ER, Santos-Burgoa C. The association between lead exposure and crime: A systematic review. PLOS Glob Public Health. 2023 Aug 1;3(8):e0002177. doi: 10.1371/journal.pgph.0002177. PMID: 37527230; PMCID: PMC10393136.

Při zmínce o těžkých kovech si někteří z Vás možná vzpomněli na léčivo z minulé úlohy – Salvarsan. Ten není jediným léčivem, který ve své struktuře obsahuje těžký kov. Dalším takovým je například *cis-platina*, látka používaná k léčbě rakoviny. Díky své schopnosti vázat se na DNA zamezuje dělení buněk, což více zasáhne právě buňky nádorové, které se oproti zdravým buňkám dělí rychleji.

2. Látka je účinná díky výměně chloridových ligandů za dusíkaté báze v DNA, které se mohou svým atomem dusíku koordinovat na platinu. Nejprve dochází k výměně chloridového ligandu za aqua ligand, který se pak v dalším kroku snadno vymění za nukleobázi v DNA (nejčastěji guanin). K výměně chloridu za molekulu vody však musí dojít až uvnitř buňky. K tomu (naštěstí pro nás, naneštěstí pro rakovinnou buňku) dochází „samo od sebe“. Tento proces se poté ještě jednou zopakuje, až dojde k zesíťování DNA.

a) Proč k výměně chloridu dojde až uvnitř buňky? Zamyslete se nad odlišnostmi extracelulárního a intracelulárního prostředí.

b) Komplex $[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$ vykazuje *cis/trans* izomerii. Nakreslete tyto izomery a vysvětlíte, proč *trans-platina* nevykazuje významnou kancerostatickou aktivitu.

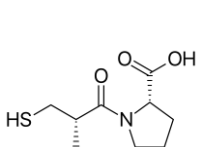
Vztah mezi strukturou a účinkem léku je, jak jsme si naznačili v minulé podotázce, stěžejní. Platí tak, že i malá změna struktury léku může zcela změnit jeho účinek. Funkční skupina, která je za účinek léku zodpovědná, se nazývá *farmakofor*. Korelaci účinku a struktury si můžeme demonstrovat například na inhibitech angiotenzin konvertujícího enzymu (zkráceně ACE inhibitech), třídě léčiv, která je používána na léčbu vysokého krevního tlaku. První z nich, *captopril*, byl poprvé syntetizovaný v roce 1975.

Příběh jeho objevení je také zajímavý. John Vane zkoumal účinky hadího jedu na krevní tlak a povšimnul si, že jistý peptid obsažený v jedu specificky inhibuje funkci enzymu přeměňujícího angiotensin I na jeho aktivní formu angiotensin II, která je zodpovědná za vazokonstrikci a následné zvýšení tlaku. Na základě struktury hadího peptidu byla navržena mnohem menší molekula, která ACE inhibovala také.

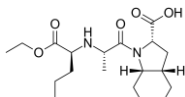
3. V dnešní době již *captopril* příliš používaný není, neboť existují jiné ACE inhibitory, které nemají tak závažné vedlejší účinky. Mezi ně patří například *enalapril*, *perindopril*, či *ramipril*.

a) Zkuste si nyní odhalit farmakofor! Na základě přiložených struktur výše zmíněných ACE inhibitorů identifikujte část molekuly, která je zodpovědná za jejich účinek.

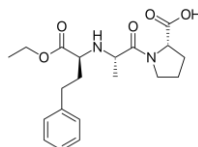
- b) Mezi závažný vedlejší účinek *captoprilu* patří agranulocytóza – významný pokles počtu granulocytů v krvi. U zbylých zmíněných léků z této skupiny pokles pozorován nebyl. Jaká skupina tedy pravděpodobně způsobuje tento vedlejší účinek?



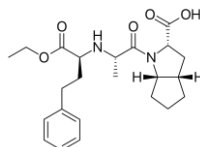
captopril



perindopril



enalapril

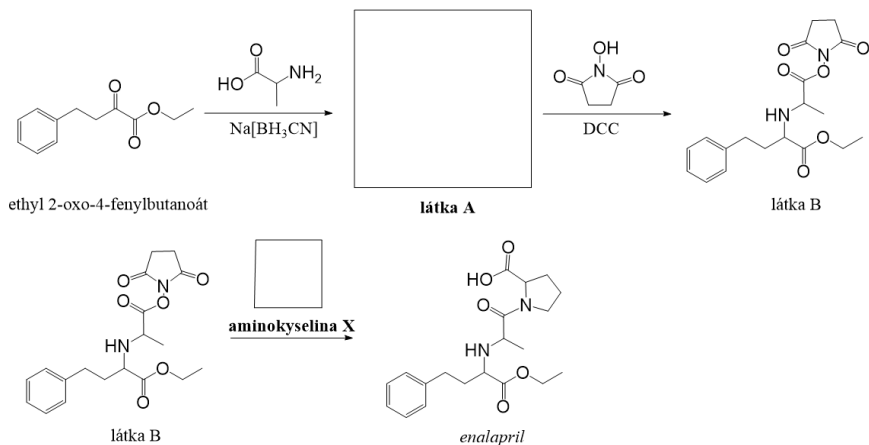


ramipril

Prvním z modifikovaných ACE inhibitorů výše byl *enalapril*. Ten byl vyvinut firmou Merck (známou jako MSD mimo USA a Kanadu, neplést s německým Merckem), a při jeho vývoji došlo k postupným změnám struktury. Při „prvním nástřelu“ byla pouze nahrazena thiolová skupina skupinou karboxylovou. Tato látka se bohužel na ACE nevázala dostatečně pevně, a tak muselo dojít k několika úpravám. Aby se molekula navázala pevněji, byla přidána část obsahující benzenové jádro. Tato látka se nicméně velice špatně vstřebávala, takže bylo nutné učinit další modifikaci a molekulu esterifikovat.

4. Jeden z možných způsobů syntézy začíná na ethyl 2-oxo-4-fenylbutanoátu, který reaguje s alaninem za vzniku látky A. Ta je následně reakcí s *N*-hydroxysukcinimidem a DCC převedena na látku B. Posledním krokem je reakce s aminokyselinou X, která poskytuje *enalapril*.

- a) Nakreslete struktury látky A a aminokyseliny X. Aminokyselinu X pojmenujte.



- b) Jaká látka se skrývá pod zkratkou DCC? Nakreslete její strukturní vzorec. Co z ní vzniká v průběhu reakce?

Esterifikovaná molekula, nazvaná *enalapril*, však nemá schopnost vázat se na ACE, a v těle tedy musí dojít k deesterifikaci. K odstranění esteru našťastí dochází v těle samovolně, a to činností jaterních enzymů.

5. Jak nazýváme látky, které samy nejsou léčivy, avšak při metabolismu se na léčiva přeměňují?

Jak to však v těle bývá, jeden enzym nemusí sloužit pouze k přeměně jedné molekuly. Cílový enzym výše zmíněných molekul má kromě konverze angiotenzinu I na angiotenzin II v popisu práce také inaktivaci bradykininu.

6. Jakým vedlejším účinkem, typickým pro ACE inhibitory, se zvýšená koncentrace bradykininu projevuje?

Od léčby vysokého tlaku přeskočíme k léčbě další civilizační choroby – cukrovky. Zde rozlišujeme 2 subtypy, které mají sice stejné příznaky, avšak příčina onemocnění je zcela jiná.

7. Jak se liší diabetes mellitus I. a II. typu? Odpovězte stručně v rozsahu maximálně 3 souvětí.

Na léčbu cukrovky I. typu se podává inzulin. K léčbě diabetu se ale nepoužívá zas tak dlouho – nedávno bylo oslaveno 100. výročí od prvního úspěšného podání inzulinu. Přitom před jeho objevením byla diagnóza cukrovky prakticky rozsudkem smrti. Pacienti museli striktně držet nízkokalorickou dietu, která je však nevléčila,

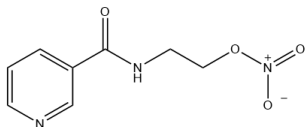
nýbrž pouze o trochu prodloužila jejich život. Souvislost mezi dysfunkční slinivkou a diabetem byla přitom známá již od roku 1889. Německý lékař Oscar Minkowski tehdy prováděl pokusy na psech a zjistil, že pes s vyoperovanou slinivkou vylučuje významné množství glukózy do moči. Následovaly různé pokusy o léčbu diabetu u zvířat pomocí podávání extraktu z pankreatu, které však nebyly příliš účinné.

Přelom nastal v roce 1920, když Frederick Banting a jeho asistent Charles Best zjistili, že mnohem účinnější je izolovat účinnou látku, inzulin, z pankreatické šťávy. O rok později se jim izolace podařila, a o další rok později, v roce 1922, podal diabetolog Elliot P. Joslin inzulin prvnímu pacientovi. Tímto pacientem byl 13letý Leonard Thompson, kterému před léčbou zbývalo nanejvýš několik týdnů života. Díky pravidelnému podávání inzulinu však žil ještě dalších 13 let. Nutno ještě dodat, že Bantingovi byla za objev inzulinu udělena Nobelova cena.

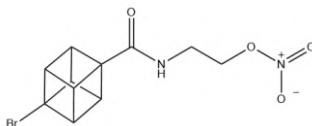
8. Nevýhodou inzulinu je, že je nutné ho podávat injekčně, a není možné ho podávat perorálně. Proč tomu tak je?

Další civilizační chorobou je ischemická choroba srdeční. Ta (nebo aspoň její projevy) se historicky léčila pomocí nitroglycerinu, látky, která fungovala dobře nejen jako léčivo, ale také jako výbušnina. Od doby nitroglycerinu ušla farmakochemie relativně dlouhou cestu, a tak se v dnešní době na její léčbu používá *nicorandil*. Ten sice obsahuje stále několik dusíkových atomů, avšak při manipulaci s větším množstvím této látky již nehrozí nemilé překvapení v podobě exploze.

Vývoj léčiv však zdaleka není u konce! V poslední době se objevuje trend zakomponovat také „krychličku“ tvořenou kubanem. Jako příklad můžeme právě *nicorandil* a jeho kubanový analog⁹, který vykazuje menší toxicitu.



Nicorandil

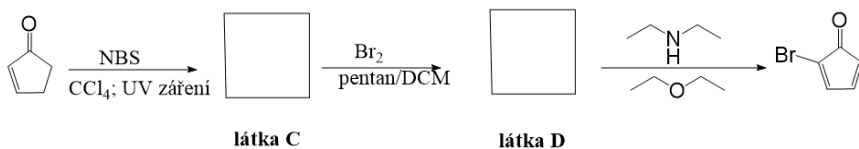


Kubanový analog

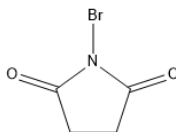
9. Problémem je, že kuban je molekula, která příliš nechce existovat (asi jako autor úlohy během zkouškového období). Má vysoké pnutí, a tak je jeho syntéza relativně obtížná.

⁹ Chalmers, Benjamin A. (2012). *Investigations into cubane based analogues of current pharmaceuticals*. PhD Thesis, School of Chemistry and Molecular Biosciences, The University of Queensland. <https://doi.org/10.14264/uql.2017.800>

- a) Syntéza kubanu začíná přeměnou cyklopent-2-en-1-onu na 2-bromcyklopentadienon. Doplňte struktury látek C a D do schématu níže.



- b) Jaký produkt by vznikl, kdyby cyklopent-2-en-1-on reagoval s NBS ve vodném prostředí a bez použití UV záření? Zamyslete se nad možnými způsoby, jakými může NBS reagovat.



Struktura NBS

V léčivech pak tato krychlička často vystupuje jako náhrada benzenového jádra. Na rozdíl od planárního benzenového jádra je trojrozměrná, a nabízí díky tomu širší prostor na přizpůsobení léku „na míru“ danému enzymu.

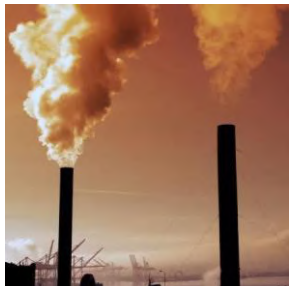
S pokrokem vědy a medicíny je vidět, že léčiva se v dnešní době již nepodávají empiricky, nýbrž jsou vyvíjena na řešení konkrétního problému, a to s využitím znalostí biologie, biochemie a v neposlední řadě také výpočetní chemie. To ovšem neznamená, že známe řešení na každý problém, který je třeba řešit.

10. Jaký je podle vás nejpalčivější problém současné medicínské chemie? Zkuste v maximálně 5 větách popsat, jakým směrem myslíte, že se bude vývoj léčiv na tento problém ubírat. **Prosím, odpovídejte bez použití umělé inteligence.**

Úloha č. 4: Acidobázická

(10 bodov)

Autorky: Zuzana Mackovjaková a Sofia Malíková



Kyseliny a zásady ovplyvňujú náš každodenný život viac, než si myslíme – od kyslých dažďov, ktoré poškodzujú lesy, až po úpravu vody, ktorú pijeme. Tieto chemické látky sú kľúčovými hráčmi v prírode aj v priemysle a potajme formujú naše prostredie.

Keď sa spomenie problematika kyselín v životnom prostredí, prvé, čo mnohým napadne, sú už v úvode spomenuté kyslé dažde. Kyslé dažde vznikajú, keď sa oxid siričitý (SO_2) a oxidy dusíka (NO_x) v atmosfére zlučujú s vodnou parou, čím vytvárajú kyseliny, ktoré škodlivo vplyvajú na pôdu, vodné plochy, budovy...

1. Prečo sú kyslé dažde častejšie v priemyselných oblastiach?
2. Kyselina sírová v kyslých dažďoch vzniká komplexnými reakciami medzi oxidmi síry a atmosférickými zložkami, ako je voda a hydroxylové radikály. Napíšte rovnice týchto reakcií podľa radikálového mechanizmu.
3. Vplyvom kyslých dažďov kleslo pH vody v jazere s objemom 50 m^3 z pôvodného pH 7 na 5,7. Vypočítajte koncentráciu H^+ iónov vo vode a hmotnosť kyseliny sírovej potrebnú na daný pokles pH.

V rámci zvyšovania acidity vodných zdrojov hrá veľkú rolu aj zvyšovanie koncentrácie oxidu uhličitého v ovzduší, čo následne ohrozuje nielen morské organizmy, ale poškodzuje aj okolité ekosystémy.

4. Stručne vysvetlite, ako prispieva zvyšovanie koncentrácie oxidu uhličitého v atmosfére k okysľovaniu oceánov.
5. Vymenujte aspoň 3 mechanizmy, ako ovplyvňuje znižovanie pH oceánov morské organizmy.

Oceány sú v prírode považované za pufre. Pufer alebo tlmivý roztok je vodný roztok slabej kyseliny a jej konjugovanej zásady alebo slabej zásady a jej konjugovanej kyseliny. Tieto roztoky majú schopnosť v určitom rozmedzí zachovať stabilné pH po pridaní kyseliny alebo zásady do systému. V prírode sa táto schopnosť uplatňuje okrem oceánov napríklad aj na udržiavanie pH v krvi.

6. Pomocou chemickej rovnice rozpúšťania oxidu uhličitého vo vode vysvetlite pufrovaciu schopnosť oceánov.
7. Pomocou Henderson–Hasselbachovej rovnice vypočítajte pH vzorky morskej vody s koncentráciou hydrogénuhličitanových iónov $20,4 \text{ mM}$ a koncentráciou

uhličitanových iónov 0,1 mM, za predpokladu, že pK_a hydrogénuhličitanu je 10,3. Vypočítajte, koľko ton oxidu uhličitého bolo oceánom absorbovaných, ak je objem svetového oceánu $1,335 \cdot 10^9 \text{ km}^3$.

Mnohé vodné zdroje majú prirodzene vyššie pH v dôsledku prítomnosti alkalických minerálov, ktoré sa vo vode rozpúšťajú a sú prospešné pre životné prostredie.

8. Aké sú hlavné ióny v prírodných vodných zdrojoch, ktoré spôsobujú alkalitu? Vymenujte 4. Ako prispievajú alkalické vodné zdroje prírodným ekosystémom?

V prírode sa môžeme stretnúť s procesom zvaným zvetrávanie, čo je proces, pri ktorom sa horniny rozkladajú na svoje úlomky vplyvom rôznych fyzikálno-chemických a biologických faktorov. Tento proces je kľúčový pre tvorbu úrodných pôd, ktoré sú dôležité najmä na poľnohospodársku produkciu.

9. Ako súvisí alkalita pôdy so zvetrávaním? Aké ióny sa uvoľňujú do pôdy počas zvetrávania minerálov a prečo je to dôležité?

Problem No. 5: Grüße aus Wien, Teil 1

(12 points)

Author: Vít Novotný



Which story is really good? The one which changes the way you tell your own story to others. I am going to tell you part of a drug discovery story. Since there is much to say, I will split it into two parts. The first one will take place more or less in a wet lab, the second among peaks. Is the story a good one? Maybe some of you will find this question the most important in this whole problem.

This problem is written in English for authenticity. Solutions are accepted in Czech, Slovak or English with no penalty in the points awarded.

The process of drug discovery can be roughly summarized in the following key points:

- Choosing a disease to be cured¹⁰.
- Analysing the biochemistry of the disease, i.e., finding a target. The target can be, for example, an enzyme catalysing a crucial step of a metabolic pathway affected by the disease.
- Approaching the target, i.e., discovery of small molecules that bind to the target and change its functionality.
- Drug formulation. How to deliver the small molecules at the right time to the target?
- Testing. This is the most expensive part with a high probability of failure. The potential drug is tested on animals, and later in clinical trials.
- Entering the market, scaling-up of the production and further clinical assessment.

We are going to dive into DC-SIGN receptor targeting. DC-SIGNs are proteins sticking out of a cell through the cell membrane. They serve as sentries: their job is to search for antigens and present them to the immune system. Hence, they play a crucial role in immune response. Sometimes, however, DC-SIGN is outsmarted and opens the gate to a pathogen instead of presenting it.

¹⁰ Maybe this point looks too trivial but the progress from this point to the last one will cost billions USD (you can search for “drug discovery funnel”). Pragmatic decisions are therefore taken now: a choice of economically impactful disease or a disease whose patients will afford the medication will avoid a hopeless bankruptcy of the project.

1. Write down three diseases facilitated by this devilry.

DC-SIGN is specialised for presenting carbohydrate (especially mannose)-containing antigens. No, we are not speaking about any sweet antigens. Carbohydrates can decorate proteins for many reasons; cellular recognition is a typical example.

2. You probably know this concept already! Characteristic *glycoproteins* are placed on red blood cells, antibodies in plasma. What classification (established in Europe by Jan Jánský) is based on this phenomenon? Answer generally in a few words.

To utilise the medicinal potential of DC-SIGN, an appropriate ligand to DC-SIGN has to be found. The idea is generally shown in figure 1:

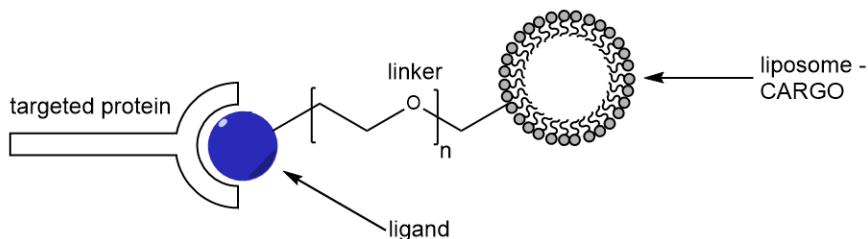
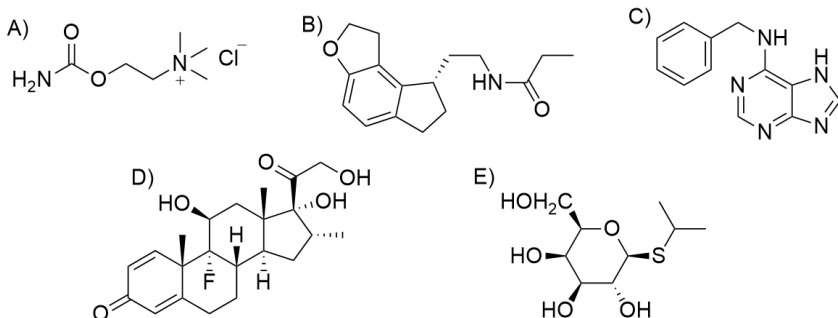


Fig. 1: A ligand (the blue ball linked to a liposome) binds to a protein. Liposome is a lipid particle with a cavity inside. Other bioactive molecules can be loaded into this cavity. This cargo is attached to the ligand through a linker. A polyethylene glycol linker is drawn as an example.

3. The affinity of DC-SIGN to mannose has already been mentioned. Explain why mannose cannot be used as a ligand. In your explanation, consider the stability of monosaccharides in metabolism and their ability to cross lipid membranes.

This obstacle can be alleviated by using mimics of the sugar. Mimics look like the original structures to the involved enzymes/receptors, but they cannot undergo the same reactions. To get familiar with the idea of mimics, work through the following task.

4. Let's have five molecules: lactose, melatonin, cortisol, acetylcholine and adenosine. The compounds A)–E) below are used as their mimics in medicinal or agricultural chemistry. Write down fitting pairs of the original molecule and the letter of its mimic (e. g., lactose – A).



The receptor is a protein, a complex mikado of chemical bonds. A gap sometimes emerges among the bonds. The ligand can be designed to stick in such pockets, so-called secondary binding sites, instead of the primary one. Our part of the story continues at the University of Vienna, where chromone-based structures were tested as secondary-binding DC-SIGN ligands.

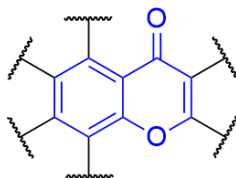


Fig. 2: Chromone core (blue) can be decorated with various substituents as indicated by the curled lines.

5. Chromone-scaffold-based structures occur naturally and often display medically valuable features. Draw one chosen chromone and write down its natural occurrence or medical effect (1 of those is sufficient for all points)¹¹.

¹¹ If you can not find good resources, visit the „[wiena praktikum](#)“ folder and open the relevant review.

To perform the testing, DC-SIGN was recombinantly prepared in *E. coli*.

6. To prepare “recombinantly” means to insert a gene for the protein into a new organism and let it synthesize the protein accordingly. To insert the gene, a so-called *vector* is used. In this case, a plasmid is used as the vector.
 - a) Bacteria have a single chromosome which contains its genome. Discuss in 1 to 3 sentences why bacteria additionally feature plasmids.
 - b) The gene for the wanted protein is not the only DNA in the plasmid vector. In this particular case, *ori* sequence, *lac* operon, and an *antibiotic resistance gene* are present. Explain the purpose of each of them.
 - c) Schematically draw, and briefly describe the structure of a plasmid. From your scheme it should be visible if it is double-strand (ds) DNA or single-strand (ss) DNA.
7. Four short paragraphs concerning the expression below. In two of them, there is a mistake. Choose them and factually defend your choice. As a clue, keywords¹² are highlighted in bold.
 - a) *E. coli* does not provide the protein in its **native conformation**. The overconcentrated protein forms clusters, so-called inclusion bodies. To get the protein natively folded, an arginine buffer is used. We can say that arginine works like a **chaperone** for DC-SIGN.
 - b) *E. coli* is a **gram-negative bacterium**. This means it is not protected by a thick layer of cellulose-backbone-based molecules decorated and crosslinked by various peptides. Gram-negative bacteria produce extreme neurotoxins like botuline, which forces scientists to meet the 4th **biosafety level** (BSL-4) requirements.
 - c) For purposes of nuclear magnetic resonance, the bacteria were fed by ¹⁵N **isotope labelled** salmiac **medium**. Luckily, the relative molecular mass difference between normal and ¹⁵N salmiac is small enough not to change enzyme kinetics of the bacteria. This could be an issue for ¹H replaced with ²H, which is double in weight.
 - d) *E. coli* is used to express the protein, since it is a relatively simple and well-known organism. When the inserted gene for DC-SIGN is **transcribed** to mRNA, it undergoes a very similar **splicing process** as it would in mammalian cells, so the obtained DC-SIGN is also comparable.

¹²Please, make sure that you understand them.

8. You are already familiar with glycoproteins. However, DC-SIGN is not glycosylated. Which organelles would *E. coli* need to perform glycosylation? Simply list the organelles; no further explanation is needed. Would *Saccharomyces cerevisiae* perform the same glycosylation as a human cell? Discuss in 1 to 3 sentences.

Wild-type DC-SIGN was prepared in *E. coli*. Nevertheless, for purposes of purification, a non-native sequence is added to its primary structure.

9. Ni^{2+} cations were immobilised on a chromatography column. These cations form complexes with certain units of the non-native motif, providing selective retention; all other proteins¹³ are eluted.

a) How is the motif called¹⁴?

b) Draw a structure of the compound which is subsequently used to elute the protein from the column.

If you are reading this paragraph, you must be quite dedicated to biochemistry! But there is still something we have omitted... biochemists need to work in a stable pH and concentration of various salts. This is why buffers are used as common solvents.

10. Actually, biochemistry is a realm of buffers.

a) Draw structures of MES and TBS buffers' active compounds (you can omit all inorganic salts).

b) TBS of pH = 7.6 was prepared at 20 °C. What must not be forgotten before the buffer is used at 4 °C? Would the problem also be encountered with MES?

After the purification, the protein was concentrated using a centrifuge and deeply frozen. We will leave the lab now. In the next series, you can look forward to the rest of this task. We will have a short trip in the mountains, then we will rather sit by a PC.

¹³ A crude mixture of lysed *E. coli* is applied on the column. The lysate naturally contains many proteins that are to be separated from the wanted DC-SIGN protein.

¹⁴ A clue: we are speaking about a *label* made of one repeating amino acid. You can take a look at common amino acids and figure out which one is able to efficiently complexate with a Lewis acid (the Ni^{2+} ions). In your answer, omit the exact number of amino acid units.

Řešení úloh 1. série 23. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Alchymistova výzva

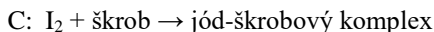
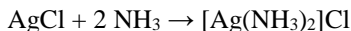
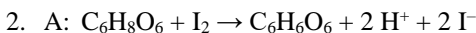
(8 bodov)

Autorka: Zuzana Mackovjaková

1. A – kyselina askorbová, B – chlorid sodný (resp. HCl alebo iný chlorid),
C – škrob, D – železnaté kationy

Z – amoniak, Y – kyslík

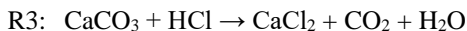
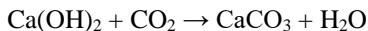
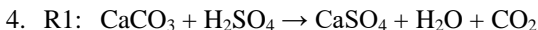
[za každú látku 0,2 bodu, celkovo 1,2 bodu]



[za každú reakciu 0,3 bodu, celkovo 1,5 bodu]

3. X – uhličitan vápenatý, W – voda, V – oxid uhličitý, U – hydroxid vápenatý,
T – pentahydrát síranu meďnatého, S – síran meďnatý, R – chlorid vápenatý,
Q – chlorid železitý

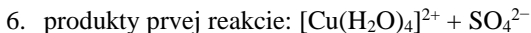
[za každú látku 0,2 bodu, celkovo 1,6 bodu]



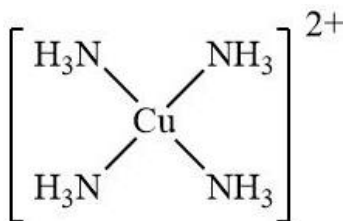
[za každú reakciu 0,3 bodu, celkovo 1,5 bodu]

5. Pojem vitriol pomenúval produkt, ktorý vznikol rozpustením kovu v kyseline sírovej.

[0,25 bodu]



tajná látka: síran tetraamminmeďnatý $[Cu(NH_3)_4]SO_4$



geometria: štvorcovo planárna

*[za určenie produktov 0,4 bodu, za
identifikáciu tajnej látky 0,25 bodu,
za správnu štruktúru a geometriu 0,5 bodu, celkovo 1,15 bodu]*

7. Akákoľvek zmysluplná odpoveď je uznaná.

[0,3 bodu]

8. Pr.: $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$ (kyselina askorbová) + $5 \text{O}_2 \rightarrow 6 \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$

$\text{Ca}(\text{OH})_2 + 2 \text{NH}_4\text{Cl} \rightarrow \text{CaCl}_2 + 2 \text{NH}_3 + 2 \text{H}_2\text{O}$

[0,5 bodu]

Úloha č. 2: Americká

(7 bodů)

Autor: Tomáš Heger

1. Kačer Donald šel na nákup. Bydlel 366 metrů od nejbližšího obchodu, a tak mu cesta trvala asi 300 sekund. V obchodě si koupil 0,23 kg kuřecích křidel a 0,23 kg barbecue omáčky. Na balení nugetek si přečetl, že je má ohřát na 394 K. A tak si kačer pochutnal na svých opeřených příbuzných.

[1 bod]

2. a) Používá se jako dezinfekce při zpracování masa. V EU je zakázán kvůli tomu, že chlorování masa se často používá jako levné řešení v případech, kdy byla daná zvířata (například kuřata) vystavena velmi nehygienickým podmínkám. Chov v těchto podmínkách přináší často větší problémy, než může dezinfekce chlorem vyřešit, a EU se tak jeho zákazem snaží této situaci předejít.
- b) Používá se jako bělidlo (například ve žvýkačkách či mléku). V EU je zakázán kvůli podezření na jeho genotoxicitu.
- c) Využíván jakožto posilovač těsta, který podporuje jeho kynutí. V EU je zakázán, protože je to iritant a možný karcinogen.
- d) Využíván jako konzervant pro delší trvanlivost. V EU je zakázán, protože je podezření na to, že může ovlivnit hormonální rovnováhu těla.
- e) Také se používá jako bělidlo (v mouce) a jako prostředek na zpevnění textury těsta. V EU je zakázán, protože při jeho rozkladu vzniká karcinogenní semikarbazid.

[za a) až e) 0,2 bodu, celkem 1 bod]

3. a) Močovina a hydrazin
- b) Nadouvadlo v pěnových materiálech, například v PVC penách
- c) Při zahřátí produkuje ADA velké množství různých plynů (mimo jiné dusík, oxid uhličitý a čpavek). Tyto plyny v pečivu způsobí jeho nabobtnání, zatímco v pěnových materiálech právě slouží k jejich nadutí a zpěnění.

[za a) 0,25 bodu, za b) 0,25 bodu, za c) 0,5 bodu, celkem 1 bod]

4. Důležité je si dát pozor na jednotky. Celková energie získaná z roční produkce sirupu (1 kcal = 4,18 kJ):

$$E = 7,5 \cdot 10^9 \cdot 4,18 \cdot 2900 \cdot 10^3 = 9 \cdot 10^{16} \text{ J}$$

Spotřeba jednoho Cybertrucku je následující (1 hp = 746 W):

$$E_c = 600 \cdot 746 \cdot 3600 \cdot 24 \cdot 365 = 1,41 \cdot 10^{13} \text{ J}$$

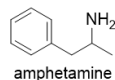
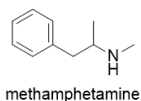
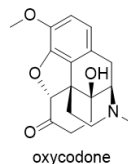
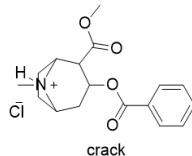
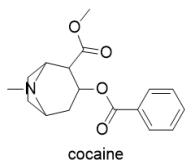
Celkem tedy pomocí HFCS můžeme pohánět $9000 / 1,41 = 6380$ Cybertrucků nepřetržitě po celý rok.

[1 bod]

5. Tropomyosin. Tento protein je běžný v mořských plodech, ale také je produkován roztoči a nachází se ve vzduchu při vyšší koncentraci roztočů.

[0,5 bodu]

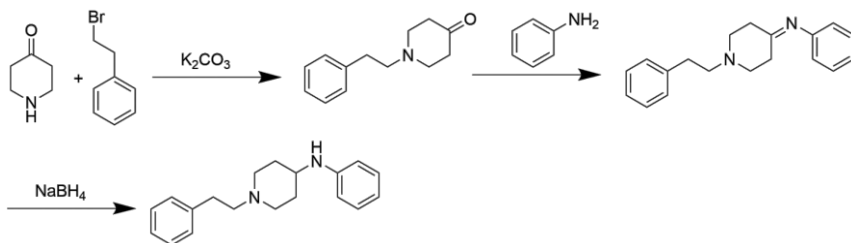
6. Coke – kokain (v podobě soli); Crack – kokain (v podobě volné báze); Meth – methamfetamin/pervitin; Oxy – oxykodon; Addies – Adderall, směs solí amfetaminu. Struktury viz níže.



Nejpříbuznější látka fentanyl je v této nabídce oxykodon, jelikož v obou případech jde o opioidy. Na rozdíl od stimulantů (kokain a amfetaminy) působí na opioidové receptory, které uvolňují především endorfiny a jejich efekt je tlumící. Stimulanty naproti tomu působí přímo na dopaminový systém a jejich efekt je, jak název napovídá, aktivizující.

[za přiřazení názvů 0,5 bodu, za text 0,75 bodu, celkem 1,25 bodu]

7. Schiffova báze je sloučenina se vzorcem $R_2C=NR'$ a vzniká v druhém kroku této syntézy. Vyplněné schéma viz níže.



[1,25 bodu]

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

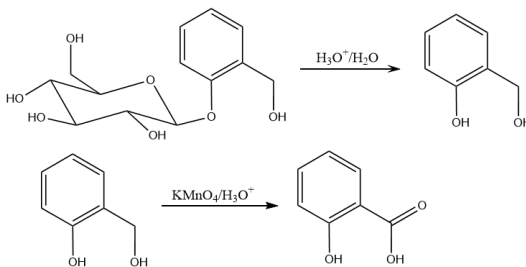
Úloha č. 3: Lčiva v průběhu věku I**(9 bodů)**

Autor: Tadeáš Grabic

1. Účinnou látkou je hirudin, který patří mezi peptidy. Hirudin inhibuje proteázu trombin, která štěpí fibrinogen na fibrin, a tím zabraňuje srážení krve.

[1 bod – 0,5 bodu za hirudin, 0,5 bodu za mechanismus]

2. Prvním krokem je hydrolyzá glykosidické vazby, tu lze provést v kyselém či bazickém prostředí. Druhým krokem je oxidace primárního alkoholu na karboxylovou kyselinu, tu lze provést například pomocí KMnO_4 . Na schématu je jedno z možných řešení, uznána budou všechna relevantní.



[0,75 bodu – 0,25 bodu za každý krok, 0,25 bodu za zakreslení kyseliny salicylové]

3. V tehdejší době se věřilo, že mor je způsoben *miasmem* – znečištěným a zapáchajícím vzduchem. Z toho důvodu se moroví doktoři pokoušeli zabránit nakažení sebe samých dýcháním vzduchu, který byl ovoněn levandulí.

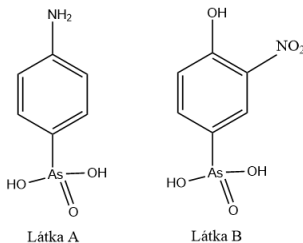
[0,5 bodu – 0,25 bodu za *miasma*, za snahu dýchat čistý vzduch 0,25 bodu]

4. Antimon se svou reaktivitou, a tudíž i toxicitou podobá arsenu. U pacienta se mohou vyskytnout poruchy srdečního rytmu, bolesti břicha, křeče a skvrny na kůži. Antimon a jeho sloučeniny jsou také karcinogenní. Dalším příznakem otravy je zvracení, které je ovšem u emetik žádoucím jevem.

[1 bod – 0,25 zvracení, 0,5 bodu za kardiotoxicitu a 0,25 za trávicí obtíže]

5. Pasteur dal do 3 baněk stejný vývar. Všechny baňky zatavil a vývar v nich zahřál nad plamenem. Obsah jedné baňky poté vystavil vzduchu, obsah druhé baňky kontaminoval částicemi usazenými na hrdle a třetí baňku ponechal stát. V první a ve druhé baňce došlo k rozmnožení bakterií, avšak obsah třetí baňky zůstal sterilní. Tím bylo dokázáno, že bakterie se ve vývaru pouze množí, ale nevznikají v něm abioticky. Dnes se pasterizace používá při konzervaci potravin, především mléka.

[1 bod – 0,5 bodu za popis experimentu, 0,5 bodu za využití]

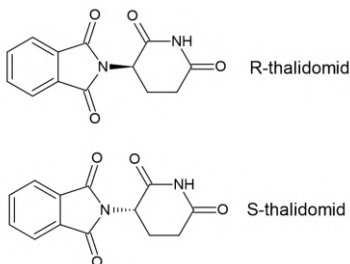


[1 bod – za každou látku 0,5 bodu]

6. V roce 1928 byl objeven penicilin. Do praxe byl uveden v roce 1941.

[0,25 bodu]

7. Racemizace je vzájemná přeměna mezi optickými izomery látky. V dnešní medicíně thalidomid kupodivu místo má – používá se pro léčbu nádorů, kožní tuberkulózy či lepru.



[1,5 bodu – 0,5 bodu za vysvětlení racemizace, 0,25 bodu za každý správně určený izomer a 0,5 bodu za uplatnění]

8. Viry využívají k replikaci aparát hostitelské buňky, takže je obtížné zasáhnout pouze virus bez významných dopadů na zdravé buňky. Pro antivirotika je typický strukturní motiv, který připomíná nukleotidy, ale neumožňuje další nárůst řetězce (příkladem jsou takzvané dideoxynukleotidy). Replikační mechanismus může tuto látku začlenit do replikované nukleové kyseliny, a tím zamezit dokončení řetězce.

[1 bod – 0,5 bodu za zdůvodnění obtížnosti léčby virových onemocnění, 0,5 bodu za typický motiv a jeho odůvodnění]

9. Hodnocena bude jakákoliv relevantní diskuze, která nebude nést známky generování umělou inteligencí.

[max. 1 bod]

Úloha č. 4: Toulky po genech

(9 bodů)

Autoři: Jan Stoklasa a Jakub Krieger

1. „NEJAKY BINARNI KOD XD”

[1 bod]

2. adenin, guanin – purin; cytosin, thymin – pyrimidin.

adenin – thymin: 2 vodíkové můstky.

cytosin – guanin: 3 vodíkové můstky.

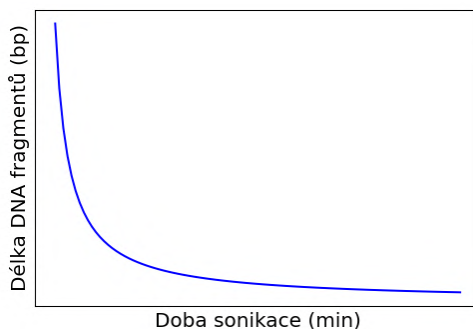
[0,2 bodu za heterocykly, 0,2 bodu za párování, celkem 0,4 bodu]

3. c) 5'...AAGGAGTCGACC...3'

[0,5 bodu]

4.

[0,6 bodu]



Obr. 1: Kvalitativní závislost délky DNA fragmentů na době sonikace

5. Komplementární vlákno: 3'–CTAATGT–5', podle standardního zápisu 5'–TGTAATC–3'; pořadí od prvního po poslední: zelená, žlutá, zelená, červená, červená, zelená, modrá.

Princip Sangerova sekvenování spočívá v tom, že fluorescenční dideoxynukleotidy se náhodně zapojují do syntézy komplementárního vlákna, čímž ji ukončují. Vznikne tak mnoho fragmentů různých délek. Jelikož DNA je záporně nabitá (je to anion kyseliny), tak se v elektrickém poli pohybuje, a to tím rychleji, čím je řetězec kratší. Pořadí barev fluorescenčních dideoxynukleotidů pak odpovídá pořadí nukleotidů syntetizované komplementární sekvence ve směru 5'→3'.

[0,75 bodu]

6. TGA, AAA, CCG, GAT

→ TGA + GAT, AAA, CCG (překryv 2)

TGAT + AAA + CCG (překryv 0)

délka sekvence je 10 znaků

[1 bod]

7. Nejkratší cesta vede přes České Budějovice a je dlouhá 120 km

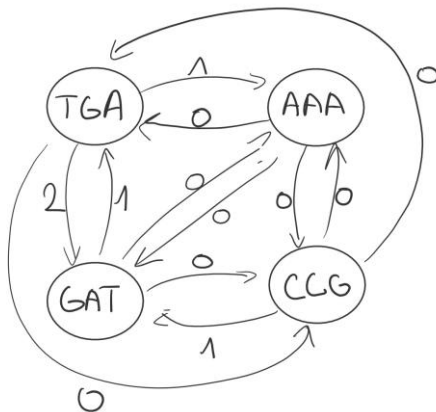
[0,5 bodu]

8. Např. Praha – Plzeň – České Budějovice – Brno – Olomouc – Ostrava

380 km

[0,75 bod]

9.



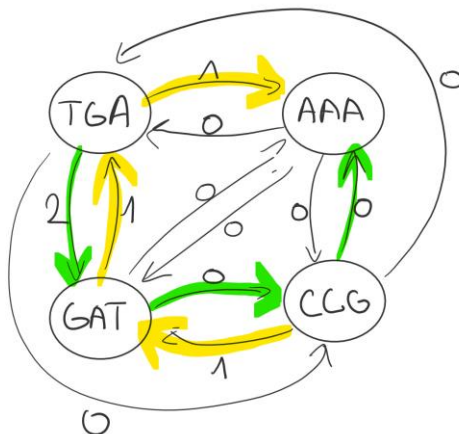
Obr. 2: Orientovaný graf

[1 bod]

10. Cesta, která navštíví všechny vrcholy a její ohodnocení bude nejvyšší.
CCGATGAAA; délka: 9 znaků

[0,5 bodu]

11.



Obr. 3: Žluté: řešení úkolu 9.), zeleně řešení úkolu 5.)

Žluté řešení lépe odpovídá našemu cíli najít nejkratší řetězec, tedy řetězec s největším celkovým překryvem.

[0,5 bodu]

12. Počet hran je v úplném orientovaném grafu s N vrcholy je $N \cdot (N - 1)$, v našem grafu, kde $N = 4$, je to 12 hran. V grafu je $N!$ možných cest upraveného obchodního cestujícího. Pro $N = 10$ jde o 90 hran a $10! = 3\,628\,800$ různých cest. Hladový algoritmus je **výrazně** rychlejší.

[1,5 bodů]

Task No. 5: Geoengineering

(13 points)

Author: Jakub Krieger

Part I – The greenhouse effect

1. a) The source of the yellow photons is sunlight, the source of red photons is the Earth's surface.
b) For example photosynthesis – chlorophyll pigments absorb visible light and turn it into chemical energy. This concentrated form of energy is then transformed into more dispersed forms of energy along the food chain and ultimately turned into heat, i.e., infrared radiation.
c) The temperature increases as the number of red photons in the lower part of the atmosphere increases.

[Problem 1a) – 0.5 points, b) – 0.5 points, c) – 0.5 points, total of 1.5 points]

2. The Wien's law expresses the peak wavelength as $\lambda_{max} = b/T$, where $b = 3.0 \cdot 10^{-3}$ m K.

Solving for the Sun surface temperature $T = 5600$ K, we get $\lambda_{max} \approx 540$ nm. Solving for the average temperature of the Earth, $T = 15$ °C = 288.15 K, we get $\lambda_{max} \approx 10$ μm. 540 nm characterizes green, 10 μm is colorless (thermal infrared).

[1 point]

3. Processes in the order of increasing energy they require:

- rotation around 2-fold axis of symmetry,
- bending,
- antisymmetric stretching,
- excitation of an electron to the lowest unoccupied molecular orbital,
- dissociation of CO₂ to CO and O,
- ionization to CO₂⁺.

The most relevant processes for climate change are bending and antisymmetric stretching, because they constitute the two most significant peaks in the CO₂ infrared spectrum (see Fig. 1).

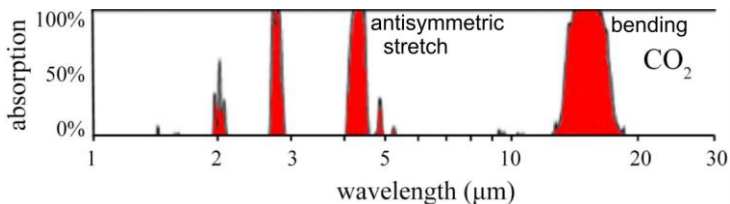


Figure I: Infrared absorption spectrum of CO₂

[1 point]

4. a) The peak in plot **A** corresponds to the peak wavelength calculated in problem 2, i.e., about 10 μm .
- b) The two most significant peaks in plot **B** correspond to bending and antisymmetric stretching of the CO₂ molecule. Note that the transmission spectrum is an inverse of the absorption spectrum.
- c) Some of the infrared photons emitted from the Earth's surface are absorbed and reemitted by CO₂ in the atmosphere. Because the direction of reemission is random, less infrared photons leave the atmosphere. To obtain plot **C** we simply multiplied plot **A** by the likelihood of transmission (plot **B**).

[Problem 4a) – 0.5 point, b) – 0.5 point, c) – 0.5 point]

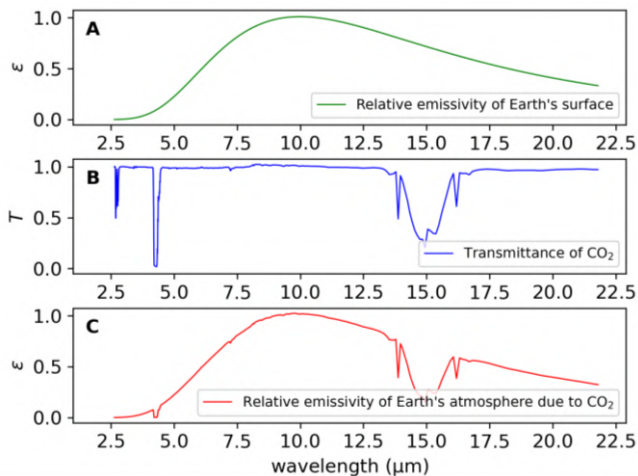


Figure 2: Spectra for problem 4.

[1.5 points]

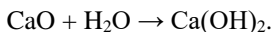
Part II – CO₂ removal

5. Processes ordered from the most carbon positive to the most carbon negative:
- burning 1 km² of rainforests for farmland – carbon positive, direct irreversible production of CO₂
 - producing 1 ton of beef – considering the current power plant mix in the Czech Republic, it would be carbon positive given the amount of the resources required; cows also produce CH₄, a strong greenhouse gas which can't be easily recovered from the atmosphere
 - making a campfire from 1 ton of fallen tree branches – carbon neutral or slightly positive – the wood would rot and decompose into CO₂ anyways
 - producing 1 MJ of energy in a nuclear power plant – carbon neutral assuming the cooling and fuel production are powered by the nuclear power plant, slightly positive considering the concrete used to build the power plant
 - burning 1 ton of biomass and capturing the produced CO₂ – carbon negative
- [0.2 points for evaluation and explanation for each case, total of 1 point]*

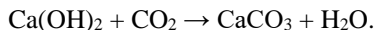
6. First, limestone is decomposed to quicklime and carbon dioxide:



Quicklime is what you buy in building materials. Mixing it with water, we get slaked lime.



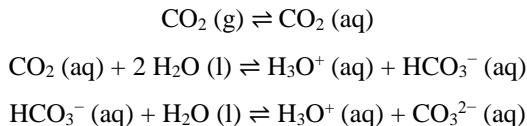
When slaked lime is exposed to the air, it dries, forming lime mortar.



Cement production can't be considered a cycle, because in the process of cement hardening, SiO₂ and other acidic oxides present (together with water) react to form cement crystals instead of CO₂. The subsequent carbonation of the hydration products is not necessary for them to gain strength. In fact, this is often associated with the deterioration of cement. More CO₂ is produced by limestone decomposition than is used up during hardening. Furthermore, both lime cycle and cement production involve heating limestone at high temperatures. Given a carbon positive power plant mix, that would also irreversibly produce a lot of CO₂, implying that neither of them is an actual cycle in the view of carbon footprint.

[0.5 point for the equations, 0.5 point for explanation of carbon positivity, total of 1 point]

7.



The carbonate ion then reacts with calcium cations to form limestone.

[0.75 point]

8. Iron

[0.75 point]

9. An amine reacts with CO_2 to form a salt consisting of an ammonium cation and carbamate (or bicarbonate) anion. The reaction's chemical equilibrium depends on temperature. Increasing the temperature will favor higher entropy states, which is the state with gaseous CO_2 .

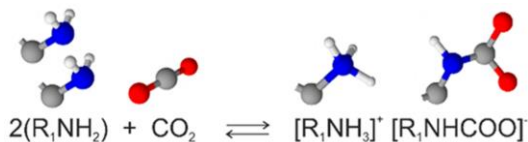


Figure 3: Example equation of amine scrubbing.

[0.5 point for the reaction, 0.5 for effect on equilibrium, total of 1 point]

10. In the text of the task, it was mentioned that to decrease the concentration of CO_2 by 30 ppm, 700 Gt of CO_2 must be removed. However, this was incorrect, as this would correspond to decrease by roughly 120 ppm. Thus, we accepted answers working either with 30 ppm or 700 Gt.

We use the definition of molar volume:

$$V = nV_m.$$

$$\text{Solving for } n = \frac{m}{M} = \frac{7 \cdot 10^{14} \text{ kg}}{0.044 \text{ kg mol}^{-1}} = 1.59 \cdot 10^{16} \text{ mol},$$

and $V_m = 5.068 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$, we get a volume of about 810 km^3 .

[0.75 point]

Part III – Solar engineering

11. a) In terms of its cumulative greenhouse effect, the most potent greenhouse gas is water.
- b) On every edge of a crystal, refraction occurs (i.e., a portion of the light bounces off). Snow consists of many tiny crystals, and hence many refractive edges, and it ends up reflecting all the incoming light. When going through an ice cube, light only passes through two edges, which only reflects a small portion of the incoming light.
- c) Clouds contribute to positive radiative forcing by their greenhouse effect – absorption and reemission of infrared light. Negative radiative forcing can be caused by reflecting visible light. That effect depends on the molecular structure, as shown in b).

[Problem 11a) – 0.25 point, b) – 0.5 point, c) – 0.5 point, total of 1.25 points]

12. Lead iodide and silver iodide were used as condensation nuclei.

[Naming one compound is sufficient, 0.25 points]

13. a) Sulfur dioxide or sulfates are meant to be injected.

b) It mimics volcano eruptions.

c) SO₂ would soon fall back to the ground, possibly in the form of acid rain.

[Problem 13a) – 0.25 point, b) – 0.25 point, c) – 0.5 point, total of 1 point]

14. Example answer on stratospheric aerosol injection: Of the geoengineering approaches mentioned, stratospheric aerosol injection is clearly the cheapest relative to its potential effect. Its scalability is questionable, given that a large mass of SO₂ would have to be carried to the stratosphere, which faces a problem similar to that described by the rocket equation¹⁵. Since we would be deliberately injecting toxic pollutants in the atmosphere, the potential hazard is high. Of the approaches mentioned, this is also the most irreversible, since we can't do anything about the SO₂, once it's in the stratosphere.

[0.75 point]

¹⁵ <https://www1.grc.nasa.gov/beginners-guide-to-aeronautics/ideal-rocket-equation/>

Literature

- Rebecca Lindsey, Luan Dahlman, *Climate Change: Atmospheric Carbon Dioxide*. Retrieved on 25th of December 2023, source: <https://www.climate.gov/news-features/understanding-climate/climate-change-atmospheric-carbon-dioxide>
- Rebecca Lindsey, Luan Dahlman, *Climate Change: Global Temperature*. Retrieved on 25th of December 2023, source: <https://www.climate.gov/news-features/understanding-climate/climate-change-global-temperature>
- Brunt, William. (2020). *Autonomous Changes in the Concentration of Water Vapor Drive Climate Change*. *Atmospheric and Climate Sciences*. 10. 443-508. doi: 10.4236/acs.2020.104025. url: https://www.researchgate.net/publication/343763552_Autonomous_Changes_in_the_Concentration_of_Water_Vapor_Drive_Climate_Change
- Jafari, Mohammad. (2017). *Application of Vibrational Spectroscopy in Organic Electronics*. url: https://www.researchgate.net/publication/320780724_Application_of_Vibrational_Spectroscopy_in_Organic_Electronics/figures?lo=1
- National Institute of Standards and Technology. *Carbon dioxide*. Retrieved on 26th of December 2023, source: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C124389&Type=IR-SPEC&Index=1>
- Hack J, Maeda N, Meier DM. *Review on CO2 Capture Using Amine-Functionalized Materials*. *ACS Omega*. 2022 Oct 28;7(44):39520-39530. doi: 10.1021/acsomega.2c03385. url: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC9647976/>
- Keisuke Nakayama et. al, *Interaction between seawater carbon dioxide dynamics ...*, *Front. Mar. Sci.*, 06 October 2022, url: <https://doi.org/10.3389/fmars.2022.991802>
- Lee, J., P. Yang, A. E. Dessler, B. Gao, and S. Platnick, *Distribution and Radiative Forcing of Tropical Thin Cirrus Clouds*. *J. Atmos. Sci.*, 2009: 66, 3721–3731, url: <https://doi.org/10.1175/2009JAS3183.1>.
- R.B. Williamson, *Solidification of Portland cement*, *Progress in Materials Science*, 1972, Volume 15, Issue 3, 189-286, url: [https://doi.org/10.1016/0079-6425\(72\)90001-1](https://doi.org/10.1016/0079-6425(72)90001-1).

Zajíček chemik

