



Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 23 (2024/2025)

Série 3



Chemie je všude: je ve vodě, je v půdě, je ve vzduchu a je i v nás samotných. Veškeré materiály jsou tvořeny chemickými látkami, chemické reakce nám každodenně pomáhají s tvarováním světa kolem nás a biochemické reakce nás vlastně utvářejí: katalytické reakce umožňují každodenní běh našich těl, neurotransmitery jsou nositeli našich emocí a naše DNA může dát vzniknout novým generacím. Avšak bez porozumění tajemným 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 3. série:
24. 2. 2025**

Elektronicky (PDF)	Papírově
<u>https://ksicht.natur.cuni.cz/aktualni-rocnik/odevzdat-resi/</u>	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.

Jarní výlet s KSICHTem

Jarní KSICHTí výlet se bude konat v první polovině března v Ústí nad Labem. Bližší informace budou zveřejněny na webu³ a přihlašování bude probíhat tamtéž.

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

³ <https://ksicht.natur.cuni.cz/akce/12-jarni-vikend-s-ksichthem/>

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 ověříš⁴.
4. Nezkopíruješ **Wikipedii** českou ni anglickou ni v jazyku jiném psanou⁵.
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 svého⁶.
9. Nepožádáš o řešení bližního svého.
10. KSICHTÍ jméno důsledně šířiti budeš.

⁴ Smyslem korespondenčního semináře je také dát vám příležitost naučit se vyhledávat, třdit a kriticky vyhodnocovat dostupné informace. Proto můžete k řešení používat jakékoli tištěné i elektronické zdroje, se kterými je ale třeba správně zacházet. Používání umělé inteligence je omezeno pravidly uvedenými na odkaze: <https://ksicht.natur.cuni.cz/navody/jak-AI-resitel/>.

⁵ 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.

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

Úvodníček

Ahoj všem suchozemským *Rattus rattus*!

Zdraví vás posádka lodi *HMS⁷ KSICHT*, která tímto přebírá kontrolu nad nadcházející sérií, která se vám právě dostala do rukou! Ničeho se nebojte, posádka je náležitě vyškolená a udělá vše pro to, aby se tato série nepotopila, ale naopak se vznášela na vlnách chemie známé i neznámé.

Pro seznámení s vaší novou posádkou vás nejprve představíme našemu palubnímu šéfkuchaři Herbymu. Všichni přece víme, že jídlo je nejdůležitější součástí každé plavby! Herby má ve svých kuchyňských zásobách spoustu brokolice, zelí, a jako zákusek pokaždé nabízí pytlík gumových medvídků. Posádka je sice díky této dietě občas trochu *Projímavá*, ale my už si zvykli, a věřím, že si brzy zvyknete i vy.

Následně se s vámi vyrazí seznámit náš navigátor Vittus. Je to zcestovalý námořník, mluví mnoha jazyky, a tak se skvěle hodí pro naše dlouhé plavby. Onehdy se mu podařilo navést naši loď proti proudu Dunaje až do Vídně! Tvrdí, že tyto své navigátorské zkušenosti chce jednou sepsat do memoáru, který má aktuální pracovní název *Grüße aus Wien*, a že už má materiál aspoň na dva díly, filuta jeden!

Ale pozor, námořnictví není jen samé sluníčko a pohoda, občas to může být pěkně bolavé, únavné, riskantní a nebezpečné povolání! Naš bocman Johnny vždycky říká, že moře je aktuálně *Neideální*, a i když jsou vyhlídky neurčité a rozbořené moře skýtá nespočet nástrah, vždy dokáže chování živlů předvídat.

Tak radši zpět k něčemu zábavnějšímu. Nedávno jsme přibrali na palubu nového zelenáče, Radka. Chvilku dělal stožární kysu, ale už nám několikrát zachránil zadek a je z něj oblíbený benjamínek naší posádky. Vždycky nám povídá o tom, jak když ještě chodil do školy, tak se snažil vypěstovat krystal jen tak ze slané roztoku. No věřili byste tomu? Je to vážně vtipálek, ale o těch *Funkčních krystalech* vypráví fakt pěkně. Nebo to jsou *krystalické funkce*?

Tak už nás znáte pěknou spoustu, ale ještě je třeba vás představit našemu kapitánovi a prvnímu důstojníkovi. Diego a Thaddeus jsou skvělé kopy, a zatím s nimi naše loď ztroskotala jen... dvakrát? No je to rekord, co vám budu. Oba ve volném čase luští křížovky, taky si pro vás jednu připravili – *Organickou křížovku*.

No a tím dnešní palubní přehlídka končí! Takže mazejte do kajut, určitě máte na čem pracovat. Užijte si plavbu, zbytek posádky se těší, že se s vámi potká třeba na *KSICHT*ím jarním výletě!

Za posádku *KSICHT*u se loučí kormidelník

Tom Sparrow Heger

⁷ HMS = Heavy Metal Ship

Seriál: Alotropické modifikace uhlíku

Autor: Zdeněk Moravec

3. díl

Třetí díl seriálu je věnován jedné z nejnovějších alotropických modifikací uhlíku – grafenu.

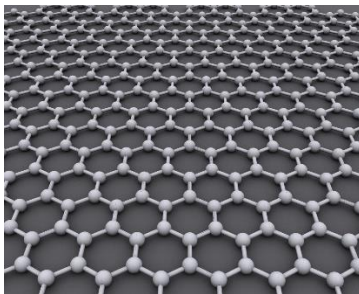
Grafit

Druhý díl seriálu byl věnován uhlíkovým nanotrubicím a fullerenům. V předposledním dílu se podíváme na jeden z nejnovějších a velmi populárních alotropů uhlíku – *grafen* a některé jeho deriváty. Zároveň se ale musíme vrátit zpět k prvnímu dílu, protože historie grafenu začíná u grafitu.

Vrstevnatá struktura grafitu samozřejmě dlouho lákala vědce k izolování monovrstvy. Teoreticky byla existence stabilní monovrstvy grafitu studována už ve 40. letech minulého století [1], na její přípravu se ale čekalo ještě několik desítek let.

Grafen

První příprava grafenu byla provedena až v roce 2004, a to překvapivě jednoduchým způsobem. Vysoce čistý grafit byl pomocí lepicí pásky postupně štěpen na menší a menší části (štěpení probíhalo samozřejmě ve směru jednotlivých vrstev), až byla izolována monovrstva. Za tento objev získal Konstantín Novoselov v roce 2010 Nobelovu cenu za fyziku [2].



Monovrstva grafitu – grafen. Zdroj: [AlexanderAIUS/Commons](#)

Monovrstva grafitu (dále budeme používat název *grafen*) byla velice dobře průhledná a vodivá. To bylo velmi důležité pro elektroniku a optoelektroniku, například pro konstrukci zobrazovacích prvků, ale potenciálně i pro fotovoltaické články.

Později bylo zjištěno, že grafen má velice zajímavé vlastnosti, ať už mechanické, elektrické nebo optické. Velice vysoká pohyblivost elektronů

v grafenu (řádově vyšší než například u mědi), a tím i velmi dobrá elektrická vodivost, je dána strukturou. Stejně jako u grafitu je i grafenová vrstva tvořena šestičlennými kruhy sp^2 uhlíků, a tři elektrony tedy vytváří kovalentní σ vazby C–C. Jeden elektron z každého uhlíku vytváří π vazbu; tyto elektrony jsou delokalizovány po celém π systému a na rozdíl od grafitu nejsou ovlivňovány interakcí s okolními vrstvami.

Elektrické vlastnosti začínají být ještě zajímavější, pokud na sebe umístíme dvě a více vrstev grafenu. Otočíme-li dvě vrstvy vůči sobě o $1,1^\circ$ (magický úhel) mohou se chovat jako izolant, a po přivedení určitého napětí se jejich chování změní a mohou vést elektrický proud bez odporu (*supravodiče*). Jde tedy o velmi perspektivní materiál pro tvorbu například tranzistorů, které budou schopny pracovat na velice vysokých frekvencích [3]. Pokud vytvoříme sendvičovou strukturu ze tří vrstev grafenu a střední vrstvu pootočíme o $1,56^\circ$, usnadníme tvorbu párů elektronů, což je pro supravodivost klíčové [4].

Grafen je také jedním z nejpevnějších materiálů, které známe [5]. I když máme zatím problém s jeho přípravou ve formě větších plátů nebo vláken, je možné ho využít jako součást *kompozitních materiálů*, například pro zvýšení pevnosti nebo vodivosti keramických materiálů.

Pro chemiky jsou samozřejmě zajímavé chemické vlastnosti grafenu. Grafen má velmi vysokou hodnotu aktivního povrchu, podle teoretických výpočtů až $2600 \text{ m}^2/\text{g}$, a atomy uhlíku v grafenu jsou navíc přístupné z obou stran, takže jeho reaktivita je poměrně vysoká. Nejreaktivnější jsou pochopitelně atomy na okrajích grafenové vrstvy a místa s defekty, například chybějící atom uhlíku (vakance). Poměrně snadno lze na grafenovou vrstvu navázat skupiny obsahující kyslík a dusík, ale známe i deriváty s halogeny, vodíkem a dalšími prvky [6].

Výroba grafenu

Příprava grafenu pomocí lepicí pásky je sice poměrně zajímavá metoda a je přístupná i laikům, ale pro získání většího množství grafenu je velice nepraktická. Proto se hledaly nové metody, které obecně můžeme rozlišit na dvě skupiny:

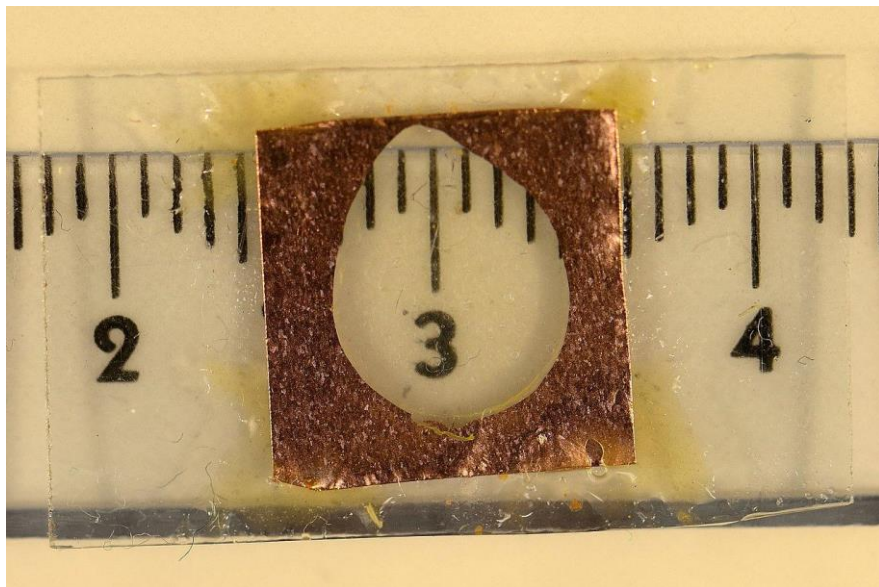
1. Top-down – v tomto případě vycházíme z grafitu, z kterého odlupujeme jednotlivé vrstvy. Tento proces se označuje jako *exfoliace* a spadá sem i využití lepicí pásky. Pro přípravu větších množství se ale zpravidla využívá působení například ultrazvuku na grafit. Grafit je nejprve podroben částečné oxidaci, čímž se zvětší vzdálenost mezi vrstvami a oslabí se soudržné síly, a poté je v sonikační lázni exfoliován. Tímto postupem nezískáme zpravidla grafen, ale takzvaný few-layer grafen, který se skládá ze dvou až deseti vrstev [7].
2. Bottom-up – vycházíme z molekulárních prekurzorů, které slouží jako zdroj uhlíku. Nejdůležitější metodou je CVD, na kterou se podíváme podrobněji.

CVD – Chemická depozice z plynné fáze

Využití depozičních metod pro přípravu grafenu bylo opravdu revolucí, která prudce snížila cenu grafenu [8]. Tato metoda poskytuje poměrně kvalitní grafen i v makroskopickém měřítku.

Obecným principem je vedení plynných prekurzorů přes žhavený substrát; na povrchu a v blízkosti povrchu substrátu dochází k rozkladu prekurzoru a vzniku požadovaného produktu. Depozice probíhá zpravidla ve vysokém vakuu.

Pro přípravu grafenu se asi nejčastěji využívá vedení směsi methanu a vodíku přes kovový nikl nebo měď při teplotě více než 1000 °C [9].



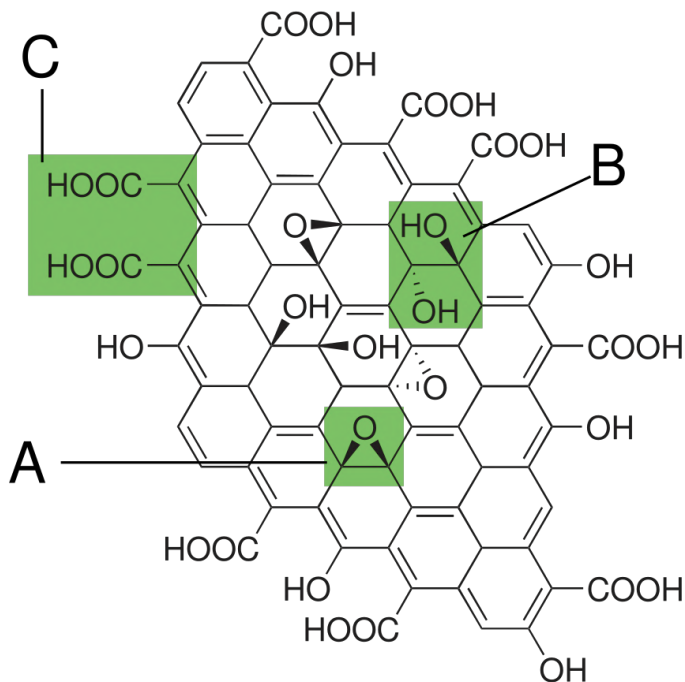
Grafen získaný pomocí CVD metody, část měděného substrátu byla odleptána, čímž došlo k odhalení transparentního grafenu. Zdroj: [Tavo Romann/Commons](#)

Deriváty grafenu

Objev grafenu vedl přirozeně i ke studiu jeho derivátů. V dnešní době jich už známe poměrně mnoho, zde se blíže podíváme jen na několik z nich.

Grafenoxid

Asi nejznámějším a nejdůležitějším derivátem je oxidovaná forma grafenu, neboli *grafenoxid*. Jeho příprava je snadnější než v případě samotného grafenu, ale jeho strukturu není možné popsat běžným chemickým vzorcem. Oxidace totiž probíhá náhodně, v závislosti na použitém oxidačním činidle a podmínkách, za kterých proces provádíme. Během oxidace dochází k zavádění oxidických skupin na grafen a tím ke změně hybridizace uhlíků z sp^2 na sp^3 . To má za následek změnu geometrie z planární vrstvy na zprohýbanou vrstvu. Ve struktuře grafenoxidu můžeme najít skupiny $-OH$, nebo $-COOH$, ale i epoxidové můstky. Během oxidace dochází ke zvýšení polarity a reaktivity grafenu, ale také k velkému snížení elektrické vodivosti.



Příklad struktury grafenoxidu, zeleně jsou vyznačeny jednotlivé funkční skupiny.

Zdroj: [Iridos/Commons](#)

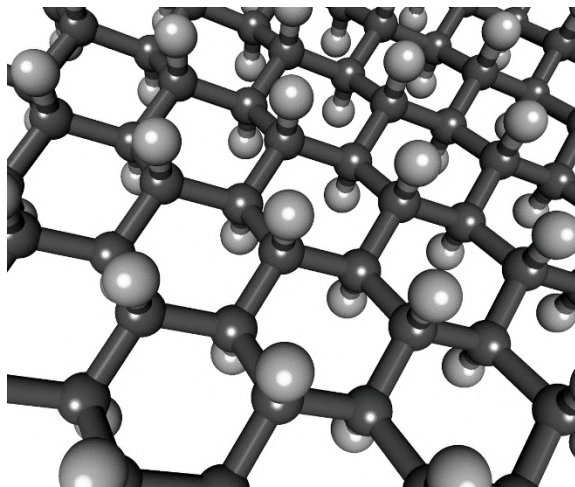
Grafenoxid lze poměrně snadno připravit takzvanou *Hummerovou metodou*, která vychází z grafitu. Ten se oxiduje, nejčastěji pomocí směsi koncentrované kyseliny sírové a manganistanu draselného. Tak získáme oxid grafitu a díky přítomnosti oxidických skupin dochází k oddálení jednotlivých vrstev, což usnadňuje jejich rozdělení (exfoliaci). K tomu lze s výhodou použít například již zmíněnou ultrazvukovou lázeň.

Redukovaný grafenoxid

Grafenoxid je poměrně snadno připravitelný materiál. Na rozdíl od grafenu je poměrně dost polární, proto se výrazně ochotněji mísí s oxidickými látkami, což je důležité pro přípravu kompozitních materiálů. Jeho vlastnosti, ať už mechanické nebo elektrické, jsou nicméně horší než u grafenu, a proto je často nutné ho redukovat zpět. To bohužel neumíme provést dokonale, proto takto získaný *redukovaný grafenoxid* obsahuje i část kyslíkatých skupin a poruchy, například vakance, vzniklé oxidací a následnou redukcí.

Grafan

Zajímavým derivátem grafenu je *grafan*, hydrogenovaný grafen. Na uhlíky v grafenu jsou navázány atomy vodíku, čímž opět dochází k zvlnění vrstvy, protože uhlíky přecházejí na hybridizaci sp^3 . Příprava je poměrně snadná, stačí vystavit grafen působení vodíkového plazmatu. Velkým bonusem u tohoto materiálu je velmi dobrá reverzibilita hydrogenace a dehydrogenace, takže by grafan mohl sloužit jako úložiště vodíku pro vodíkové hospodářství [10].



Struktura grafanu. Zdroj: [Edgar181/Commons](#)

Závěr

V tomto díle jsme se krátce podívali na první 2D materiál, grafen. I když jsme se zatím nedočkali jeho masového využívání, dá se očekávat, že se s ním budeme potkávat stále častěji. V dnešní době už známe desítky jiných 2D materiálů a některé dokáží grafen i překonat [11]. Příkladem je borofen, 2D alotropická modifikace boru, poprvé připravená roku 2015. Tento materiál je pružnější než grafen a vykazuje lepší biokompatibilitu, což je velice zajímavé pro aplikace v medicíně [12].

Literatura

1. The Band Theory of Graphite. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
2. Nobelova cena za fyziku 2010. <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/press-release/>
3. Study: Superconductivity switches on and off in 'magic-angle' graphene. <https://phys.org/news/2023-01-superconductivity-magic-angle-graphene.html>
4. Physicists create tunable superconductivity in twisted graphene 'nanosandwich'. <https://phys.org/news/2021-02-physicists-tunable-superconductivity-graphene-nanosandwich.html>
5. Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene. <https://doi.org/10.1126/science.1157996>
6. Chemistry of Graphene Derivatives: Synthesis, Applications, and Perspectives. <https://doi.org/10.1002/chem.201704192>
7. Top-down synthesis of graphene: A comprehensive review. <https://doi.org/10.1016/j.flatc.2021.100224>
8. The Price Of Graphene. <https://www.graphenea.com/pages/graphene-price>
9. Recent progress in low-temperature CVD growth of 2D materials. <https://doi.org/10.1093/oxfmat/itad010>
10. Graphene's cousin: the present and future of graphane. <https://doi.org/10.1186/1556-276X-9-26>
11. Recent Advances in 2D Material Theory, Synthesis, Properties, and Applications. <https://doi.org/10.1021/acsnano.2c12759>
12. Wonder Material 'More Remarkable' Than Graphene Has Medical Potential. <https://www.newsweek.com/wonder-material-remarkable-graphene-medical-potential-1897893>

Zadání úloh 3. série 23. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Projímavá

(7 bodů)

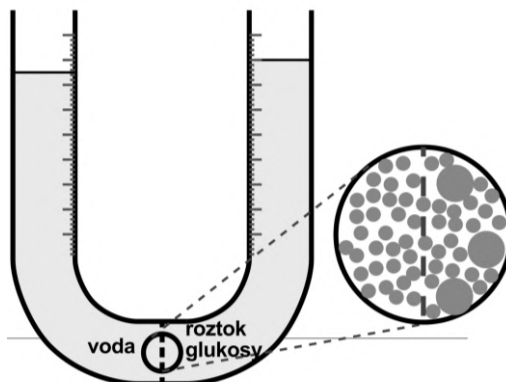
Autor: Jiří Kysilka



“Gumoví medvědci bez cukru? No to je snad hotový sen!” pomyslel si chemik Jeremy. „Konečně jich mohu sníst tolik, kolik chci, a nemusím se obávat o svou štíhlou linii.” Netušil však, jak nepříjemné překvapení ho bude čekat za pár hodin. Když s útrpným výrazem opouštěl toaletu, rozhodl se, že tomuto jevu bude muset přijít na kloub.

Když se určité látky dostanou do trávicího traktu, mají takzvané laxativní neboli projímavé účinky. Mnohé z nich se z tohoto důvodu využívají v lékařství, jindy však může tento laxativní efekt nepřipraveného konzumenta nepříjemně překvapit. K takovému působení může vést více různých mechanismů, například promazání stolice minerálním olejem nebo stimulace vyšší aktivity střevních stěn. My se však v této úloze zaměříme na látky, které svými fyzikálně-chemickými vlastnostmi způsobí to, že se do trávicího traktu začne nasávat větší množství vody. Jaký to má výsledek, si jistě dovedete představit, takže tu nemusíme zacházet do naturalistických detailů. Společně však prozkoumáme detaily méně naturalistické, fyzikálně-chemického rázu.

Nejprve se seznámíme s fyzikálně-chemickým jevem, který za tímto chováním stojí. Představme si následující uspořádání. Máme nádobu ve tvaru U trubice, která je dole rozdělena polopropustnou membránou. Ta propouští pouze molekuly vody, ale nikoli molekuly rozpuštěných látek. Vzniknou nám tak dvě oddělení, která můžeme naplnit odlišnými



Obrázek 1. U-trubice s detailem molekulární úrovně

roztoky. Obě ramena jsou opatřena délkovou stupnicí, takže můžeme naplnit oba roztoky do stejné výšky a také sledovat, jak se výška obou hladin bude měnit v průběhu času.

1. Představte si, že jedno rameno naplníte destilovanou vodou a druhé rameno roztokem glukosy. Jaké změny budeme moct pozorovat na makroskopické úrovni a co bude probíhat na molekulární úrovni? Jak se nazývá tento fyzikálně-chemický děj?
2. V závislosti na přesné molární koncentraci roztoku glukosy by tento děj neprobíhal donekonečna, ale po určité době by se výšky hladin v obou ramenech ustálily. Jak byste toto pozorování vysvětlili? Co bude tvořit protiváhu ději z otázky 1 a jak se tato veličina nazývá?

Jeremyho toto chování zaujalo, tak se rozhodl, že se o něm dozví více. Chtěl vědět, jak se budou chovat jiné látky, a zjistit, na čem všem tento jev závisí. Připravil si následující roztoky:

A: 0,05mM roztok glukosy

B: 0,1mM roztok glukosy

C: 0,05mM roztok NaCl

D: 0,05mM roztok CaCl₂

Připravil si čtyři aparatury uspořádané stejně jako v předchozím experimentu, tedy U trubice rozdělené polopropustnou membránou, která propouští pouze vodu. Do jednoho z ramen nalil vždycky destilovanou vodu, do druhého ramene nalil jednotlivé roztoky A–D. Na počátku byly obě hladiny stejně vysoko. Nechal potom roztoky stát dostatečně dlouhou dobu, až se hladiny ustálily v nových výškách. Potom změřil s přesností na čtvrt centimetru rozdíl výšek mezi jednotlivými hladinami pro všechny čtyři roztoky. Výsledky ho velice zaujaly:

A: 1,25 cm

B: 2,5 cm

C: 2,5 cm

D: 3,75 cm

3. Jistě jste si i vy všimli toho, že rozdíl výšek hladin pro roztoky B a C je dvojnásobkem rozdílu výšek roztoku A, a roztok D vede dokonce k trojnásobnému rozdílu výšek. Dokážete toto pozorování zdůvodnit? Vytvořte nejjednodušší možnou hypotézu na základě naměřených dat. Na čem závisí míra námi pozorovaného jevu?

Tento fyzikální jev je zodpovědný za celou řadu procesů, které můžeme pozorovat v přírodě nebo i v rámci jednoduchých experimentů. Pojďme využít zákonitostí, které jsme právě odhalili, a zkusme předvídat výsledek několika jednoduchých experimentů.

4. Máte k dispozici vajíčko citlivě zbarvené vápenatě skořápkou tak, že bylo přes noc namočené do octa, jeho polopropustná membrána je tedy zachována. Co se s tímto vajíčkem stane, když jej ponoříme do glukosového sirupu, tedy extrémně koncentrovaného roztoku glukosy? Popište, jaký děj by začal probíhat a co byste pozorovali.
5. Co byste pozorovali, kdybyste živé buňky ponořili do destilované vody? Buňky si teď pro naše účely můžeme představit jako váčky ohraničené polopropustnou membránou, které jsou vyplněné zředěným roztokem především sodných a draselných solí.

Teď se ale vraťme zpět k našim střevním dobrodružstvím. Stěnu tenkého střeva si samozřejmě nemůžeme představit jako jednoduchou polopropustnou membránu z našeho pokusu, protože musí kromě vody propouštět také celou řadu dalších látek (například některé ionty a rozštěpené živiny, které se ze střeva potřebují dostat do krve). Rozhodně však ale nepropustí všechno. Vnitřní prostředí organismu považujte za stálé.

6. Roztok glukosy žádné projímavé účinky nemá, avšak roztok sorbitolu (cukerného alkoholu) ano. Jak byste toto vysvětlili? Jakou důležitou vlastnost musí rozpustná látka mít, aby měla projímavé účinky?

Epsomská sůl – heptahydrát síranu hořečnatého – je známým laxativem, které se v lékařství používá jak pro své projímavé účinky, tak také jako činidlo umožňující čištění střev před určitými lékařskými zákroky nebo vyšetřeními. Oproti tomu běžná kuchyňská sůl, NaCl, projímavé účinky nemá. Jisté soli projímavé účinky mají, zatímco jiné ne. Tabulka níže ukazuje tři běžné kationty a tři běžné anionty, a poskytuje informaci, zda u daných solí pozorujeme projímavé účinky.

Tabulka 1. Projímavé účinky běžných solí

kationty (dolu) / anionty (vpravo)	Cl ⁻	SO ₄ ²⁻	citrát
Na ⁺	nemá	má	nemá
K ⁺	nemá	má	nemá
Mg ²⁺	má, mírné	má, silné	má

7. Co díky tomuto pozorování můžete usuzovat o vlastnostech výše zmíněných kationtů a aniontů?

Sacharid laktosa (disacharid glukosy a galaktosy), který se vyskytuje v mléce a mléčných výrobcích, u běžné europoidní populace nevyvolává projímavé účinky, neboť se ve střevě rozloží na monosacharidové jednotky, které jsou vstřebány. Část populace však trpí takzvanou intolerancí laktosy, která se projevuje průjmem, nadýmáním, plynatostí, někdy až nevolností, bolestí břicha a křečemi.

8. Vysvětlete, co je příčinou intolerance laktosy a proč vede k výše uvedeným obtížím.

Sacharid laktulosa (disacharid galaktosy a fruktosy) se v přírodě běžně nevyskytuje, takže jej naše tělo neumí rozložit a vstřebat v tenkém střevě. Sama o sobě by v tenkém střevě vyvolala projímavý účinek. Avšak poté, co laktulosa doputuje do tlustého střeva, je navíc vystavena fermentaci, která projímavý efekt ještě umocňuje. Fermentaci si můžeme zjednodušeně představit jako takovou hydrolyzu laktulosity na kratší mastné kyseliny a plynné látky:

Laktulosa ($C_{12}H_{22}O_{11}$) + $H_2O \rightarrow 2$ Acetát ($C_2H_4O_2$) + Propionát ($C_3H_6O_2$) + Butyrát ($C_4H_8O_2$) + CO_2 + CH_4 + H_2

9. Představme si modelovou situaci, při níž se 0,1M roztok laktulosity dostane do tlustého střeva, kde je výše uvedeným fermentačním procesem plně zfermentován na své fermentační produkty. Zkuste kvantifikovat, jak moc se v takovém případě zvýší působení onoho fyzikálně chemického jevu, který v této úloze upoutal naši pozornost už v první otázce. Kolikrát by plná fermentace zvýšila celkový projímavý efekt?

10. Kdyby čistě hypoteticky tento fermentační proces proběhl už v tenkém střevě namísto tlustého, pozorovali bychom totéž, nebo by byl výsledek jiný? Popište, jaký výsledek byste očekávali, a svá očekávání zdůvodněte.

Problem No. 2: Grübe aus Wien, Teil 2

(10 points)

Author: Vít Novotný

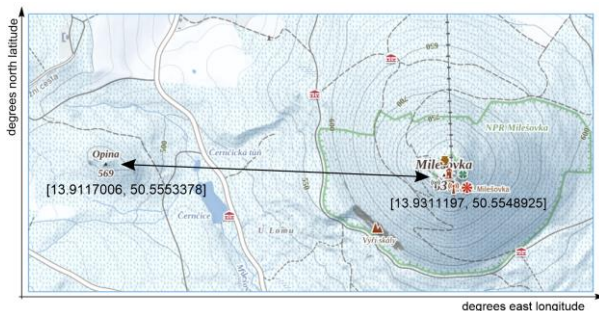


In the last series, we entered a story of drug discovery. We followed the process of our target protein preparation, and finally we got a pure concentrated ^{15}N labelled DC-SIGN receptor. In this part, we will leave the biochem-lab and measure and evaluate data.

Again, solutions are accepted in Czech, Slovak, English or German with no penalty in the points awarded.

Before we really begin working, I have planned a nice walk for you:

11. For our purposes, a geographer is kindly asked for forgiveness, its map shall be a Cartesian plane with x -axis defined by the equator and y -axis by the prime meridian. The idea is depicted in the picture:



A bit straightforward trip is planned from Milešovka peak with coordinates⁸ [13.9311197, 50.5548925] to Opina peak, coordinates [13.9117006, 50.5553378], as the double arrow shows. Express the distance between the peaks in degrees. Convert the distance to km, assuming that 1 degree stands for 111.111 km. Provide your computation procedure.

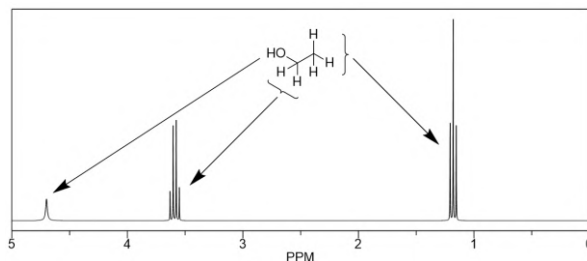
Enough fun, the measurements await us! However, the geographer shall be provoked a bit further: it is not that inaccurate to think about NMR (nuclear magnetic resonance) in an analogy with a compass. Go through this thought experiment first:

- a) Put a magnet near the compass, the needle will point to it.

⁸A geographer would write the coordinates in [latitude, longitude] format as well as a well-behaved tourist would search for some reasonable path. The author anyway obeys a mathematician's convention for demonstrative purposes.

- b) Use your finger to push the needle away from the magnet. You feel the needle pressing your finger, as it does not want to move from its most comfortable position.
- c) Put your finger away. The needle immediately turns back to point to the magnet.
- d) Repeat the experiments, but place your compass in a cage made of weakly magnetic rods. You would qualitatively observe the same kind of behaviour. Quantitatively, however, the needle would push your finger with a different force and return into a position that differs from the original experiment.
12. Here are some items mentioned in the thought experiment: *weakly magnetic cage, pushing finger, compass needle near a magnet, returning needle* – i)).
- A nucleus with nonzero spin has a magnetic moment. An NMR spectrometer applies a strong magnetic field to the sample.
 - An energy impulse (radio waves) is released to the sample. The impulse forces the nucleus to occupy an excited state.
 - After the impulse, the nucleus deexcites by releasing its own signal with a given frequency.
 - Electron densities surrounding the nucleus influence the frequencies of its deexcitation.

According to iv), the NMR spectra are therefore shaped by electron densities. Electron densities correspond to chemical bonds and their angles; thus, NMR can be used to retrieve this geometrical information. The following figure shows a model spectrum of ethanol, the arrows assign the hydrogens to their peaks.



The difference between the frequency of a measured atom and that of a standard, divided by the frequency of the used NMR spectrometer, is given in ppm (parts per million) and is usually plotted on the *x*-axis. The *y*-axis corresponds to intensity of signal.

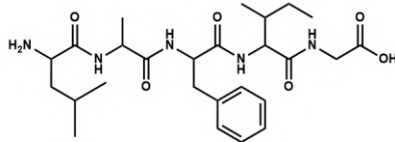
Let's think about the map from the 1st task. Imagine that you travelled parallel to one of the axes. Your road profile could look like this:



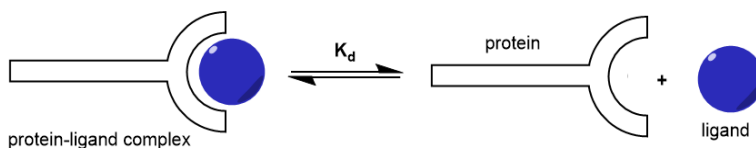
Now take a look at a simple 2D NMR spectrum⁹. If you go directly “to the north”, your altitude profile follows a ^{13}C NMR spectrum, if you go directly “to the east”, your feet will trample ^1H NMR. The peaks in the landscape occur when a maximum value is reached from “eastern” and “northern” direction at the same time. Such a peak corresponds to (a) hydrogen(s) attached to a carbon atom. For example, the carbon number 6 binds to one hydrogen. The arrows point to the resulting 2D peak.

⁹ It is called ^1H - ^{13}C HSQC, to be correct.

14. The sample contained the MES buffer you know from the first part of this problem. Name two reasons why we cannot observe its molecules in the spectrum. The majority of peaks was caused by one repeating functional group in the protein's structure. Which motif is it? The simple peptide on the right can be a clue.



DC-SIGN, the target, is in gunsight, and chromones are the ammunition. A K_d constant is used to determine if there is a hit. If yes, the small molecule is a good ligand for the protein: a stable protein-ligand complex is formed. K_d is an equilibrium constant of decomposition of the protein complex. Thus, the lower K_d , the better binding.

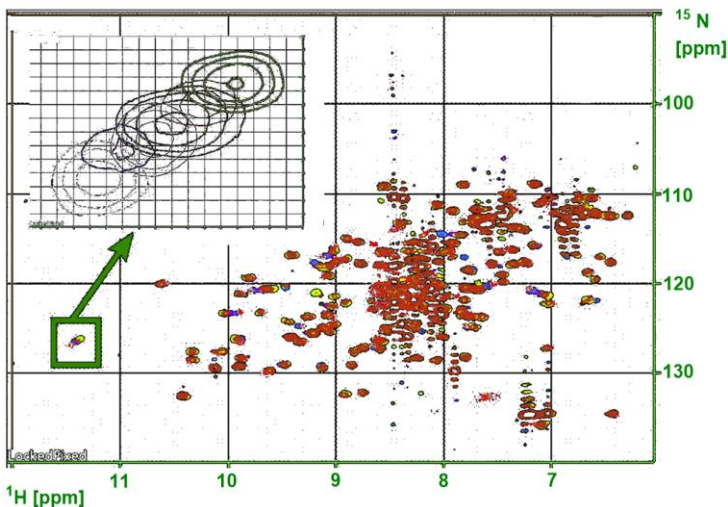


15. Write down the mathematical expression for K_d . Use $[P]$, $[L]$ and $[PL]$ for protein, ligand and complex equilibrium concentration¹⁰.

Love moves mountains (by a wonder), so do good ligands with protein's NMR peaks (by electron density changes). The following figure shows six overlaid NMR spectra, each of the same protein with different concentration of ligands added. The dark green one is a reference protein with no ligand added, the lightest one corresponds to the highest ligand concentration. Shift in the green box is detailed in the inset.¹¹

¹⁰ K_d is given in the dimension of concentration, which is a clue. A physical chemist would always divide the equilibrium concentration by a standard concentration, making every equilibrium constant dimensionless. In biochemistry, K_d given in dimension of concentration provides, for example, a reasonable comparison with the solubility of the ligand.

¹¹ The original plot is in colours incompatible with printing to this brochure. However, the recolouring decreased the legibility. The original figure is available in this shared folder: https://drive.google.com/drive/folders/1jxUsartat_5KDDYNg8KLaqlkzW3T69Ca?usp=sharing



Let's quantify the shift. It is a bit similar to the Milešovka–Opina trip. The observed chemical shift δ_{obs} is calculated as follows:

$$\delta_{\text{obs}} = \sqrt{1/2 \cdot [(\delta_{\text{H}})^2 + (\alpha \cdot \delta_{\text{N}})^2]}$$

δ_{H} respectively δ_{N} are differences¹² in chemical shift [ppm] between the reference and a given spectrum, α is an empirical factor equal to 0.14. If you are curious about a more detailed explanation, take a look at an article from M. P. Williamson available in this folder: https://drive.google.com/drive/folders/1jxUsartat_5KDDYNg8KLaqlkzW3T69Ca?usp=sharing.

16. The following table contains coordinates of the shifted peaks from the white box you see above, and ligand concentrations responsible for the shifts. Fill in the table. The table is provided for copying in a Google sheet in the folder above, so you do not have to rewrite it by hand. Write down one example of the calculation, or provide the formula you used in your table processor.

Ligands concentration [mM]	0	0.156	0.625	1.250	2.500	5.000

¹² The coordinate of the sample with a given ligand concentration is subtracted from the reference (no ligand) coordinate.

^1H coordinate [ppm]	11.371	11.391	11.411	11.421	11.442	11.453
^{15}N coordinate [ppm]	126.150	126.310	126.456	126.554	126.651	126.846
δ_H [ppm]	none					
δ_N [ppm]	none					
δ_{obs} [ppm]	none					

From the Williamson's article, we know a relationship between δ_{obs} and K_d :

$$\delta_{obs} = \delta_{max} \cdot \frac{([P] + [L] + K_d) - \sqrt{([P] + [L] + K_d)^2 - 4 \cdot [P] \cdot [L]}}{2 \cdot [P]}$$

$[P]$ and $[L]$ [mM] are initial concentrations, and δ_{max} [ppm] is the theoretical maximal shift after a complete saturation by the ligand. Again, if you are curious about details, do not hesitate to take a look into the article.

17. From the table above you know values for δ_{obs} and L . P was 0.1 mM. Your task is to fit δ_{max} and K_d using a simplified example of a processing code. The required output is:

- i) A plot of observed chemical shift as a function of the total ligand concentration, with the ligand concentration on the x -axis and the observed chemical shift on the y -axis.
- ii) δ_{max} and K_d values, including units.

In the uploaded folder, there is a python code template. Use it. It needs your adjustments, then it will provide a graphical output. Insert the plot to your solution, making sure that it contains all answers to problem 7. Nothing else is required.

You can use for instance [Spyder](#) for opening Python files, but the choice should not matter. You can even adjust the code in any .txt editor and then ask ChatGPT to run it. If you submit your solutions on paper, simply draw the output of the plot.

18. Drugs usually have K_d in nanomolar or lower range. Try to briefly suggest, what shall we, as scientists outside industry, do with the compound we have just evaluated.

You have just evaluated your first potential drug. In research, you would test all the shifted peaks, not just one as we did. The principle, however, would be the same, just with a bit of statistics. Congratulations!

The end.

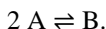
Úloha č. 3: Neideální I**(8 bodů)**

Autor: Jan Vavřín



Při výpočtech chemických rovnováh většinou předpokládáme, že se látky chovají ideálně. To ale není vždycky pravda. Nejčastějším příkladem jsou roztoky iontů; ty jsou ale zbytečně složité. V této úloze se raději podíváme na zjednodušený model chemické reakce. Zapomeneme na atomy a molekuly, místo nich budeme mít jen „kuličky“ – a zkusíme zjistit, odkud se neidealita vlastně bere.

V celé úloze se budeme zabývat velmi jednoduchou reakcí – dimerizací v plynné fázi. Tu si můžeme schematicky zapsat jako



1. Najděte konkrétní příklad takové reakce. Očekávali byste, že její změna entropie bude kladná, nebo záporná? Vysvětlíte jednou větou.

Nápověda: Systémy, které jsou „neuspořádanější“ (tedy mají více způsobů, jak v prostoru poskládat své molekuly), mají vyšší entropii.

Tuto reakci lze popsat rovnovážnou konstantou K . Platí, že

$$\frac{p_B p^\circ}{p_A^2} = K, \quad (1)$$

kde p_A a p_B jsou parciální tlaky látek A a B a p° je standardní tlak ($p^\circ = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$). Ve vztahu (1) jsme ale udělali jeden skrytý předpoklad. Počítali jsme totiž s tím, že A a B se chovají ideálně. Ve skutečnosti bychom měli psát

$$\frac{a_B}{a_A^2} = K,$$

kde a_i je tzv. **aktivita** látky i . Pro ideální plyny platí

$$a_i = \frac{p_i}{p^\circ}$$

a dostaneme tak vztah (1).

2. Jaké předpoklady splňuje ideální plyn? Jakým způsobem je skutečné plyny porušují?

Ve zbytku úlohy se pomocí jednoduchého modelu pokusíme podívat na to, co způsobuje neideální chování a jaký to má vliv na chemické reakce.

3. Látku A bude reprezentovat jedna kulička, ●, zatímco látka B, jakožto dimer, budou dvě spojené kuličky, ●—●. Energii potřebnou k rozbití této vazby označíme jako ε .

Látky se nebudou pohybovat volně v prostoru, nýbrž na mřížce s N políčky. Na jednom políčku se může nacházet maximálně jedna kulička. Typické stavy (budeme jim říkat *mikrostavy*) našeho systému tak budou pro $N = 6$ vypadat nějak takto:

mikrostav	N_A	N_B	E
			$-\varepsilon$
		0	
	1		

- a) Doplňte tabulku. N_A je počet molekul A, N_B je počet molekul B a E je energie daného stavu.
- b) Nakreslete všechna možná uspořádání pro případ, kdy $N = 4$ a máme dohromady tři kuličky. Uspořádejte je do podobné tabulky.

Nás ale nezajímá, kde přesně částice jsou – stačí nám vědět, kolik molekul máme látky A a kolik látky B, tedy hodnoty N_A a N_B . Takovému popisu se říká *makrostav*.

- c) Každý makrostav se „skládá“ z určitého množství mikrostavů. Kolik mikrostavů má makrostav ($N_A = 1$, $N_B = 1$)? [Stačí využít tabulku z (b).]

Lze ukázat, že počet mikrostavů v makrostavu s N_A molekulami A a N_B molekulami B na mřížce s N políčky je dán vzorcem

$$W(N, N_A, N_B) = \frac{(N - N_B)!}{N_A! N_B! (N - N_A - 2N_B)!}$$

Pro entropii¹³ (libovolného) makrostavu platí vztah $S = k_B \ln W$.

4. Nejprve se vrátíme o krok zpět a zkusíme se podívat na situaci, kdy v systému máme pouze molekuly reaktantu, tedy látky A (máme tedy $N_B = 0$).

¹³V jednotkách J/K. Pro molární entropii bychom vztah museli vynásobit Avogadrovou konstantou.

- a) Přesvědčte se, že v tomto případě je $W = \frac{N!}{(N-N_A)!N_A!}$. Vysvětlete tento výsledek pomocí kombinatoriky¹⁴. [max. 2 věty]
- b) Lze ukázat, že pro dostatečně velké x platí takzvaná Stirlingova aproximace, $\ln(x!) \approx x \ln(x) - x$. Použijte tuto aproximaci a odvoďte tak, že entropie našeho systému je

$$S \approx k_B [N \ln N - N_A \ln N_A - (N - N_A) \ln (N - N_A)]$$

Nakreslete graf závislosti entropie na N_A a označte na něm zajímavý bod (nebo zajímavé body).

Ze vzorečku pro entropii lze získat i **chemický potenciál** μ_A látky A v našem systému.

$$\mu_A = k_B T \ln \frac{N_A}{N - N_A}$$

Ten nám říká, jak vysokou má látka „chemickou energii“. Látky s vysokým chemickým potenciálem budou chtít pryč ze systému, pokud to jen půjde – například tak, že zreagují s jinou látkou.

(Absolutní) **aktivita** látky A je pak jen to, co je uvnitř logaritmu. Tedy

$$a_A = e^{\mu_A/k_B T} = \frac{N_A}{N - N_A}.$$

Pro „ideální“ látku bychom očekávali, že aktivita je prostě daná koncentrací, tedy něco jako

$$a_{id} = \frac{N_A}{N} \text{ (v našem systému hraje } N \text{ roli objemu).}$$

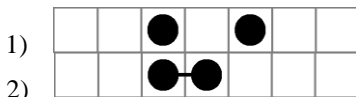
- c) Neidealita je důsledkem interakcí mezi molekulami. Vysvětlete, proč se aktivita látky A liší od ideální aktivity. Jakým způsobem spolu v našem modelu interagují molekuly A?
- Nápověda: Co by se stalo, kdyby na jednom políčku mohlo být libovolné množství kuliček? Chovala by se pak látka A ideálně?
- d) Co v našem systému reprezentuje výraz $N - N_A$? Jak si tedy můžeme interpretovat vzoreček pro aktivitu látky A? [max. 2 věty]
- e) Můžete si všimnout, že pokud látka A zabírá jen malé množství místa (tedy N_A je mnohem menší než N), pak se její aktivita blíží k ideální aktivitě.

¹⁴Zkuste si vyhledat pojem *kombinační číslo*.

Vysvětlete, proč tomu tak musí být. [Zamyslete se nad definicí ideálního plynu z otázky 2.]

5. Nyní se pojdme podívat, jak výsledky předchozí úlohy ovlivní molekuly látky B, které na rozdíl od A zabírají dvě místa.

V naší reakci vezmeme dvě molekuly A a uděláme z nich jednu molekulu B. Pojdme si ukázat, že B efektivně „zabírá méně místa“ než dvě samostatné molekuly A. Představte si následující situace:



Nyní zkusíme přidat ještě jednu molekulu látky A nebo B, aniž bychom hýbali částicemi, co už v systému jsou. Například do systému 2 můžeme přidat molekulu dimeru takto:



- Kolik existuje různých možností, jak přidat jednu molekulu látky A do systému 1? A do systému 2?
- Kolik existuje různých možností, jak přidat jednu molekulu látky B do systému 1? A do systému 2?
- Vysvětlete tvrzení, že B efektivně „zabírá méně místa“. Bude se to projevat spíše při nižších koncentracích, nebo při vyšších?

Úloha č. 4: Krystalické funkce nebo funkční krystaly?**(12 bodů)**

Autor: Radek Jiša

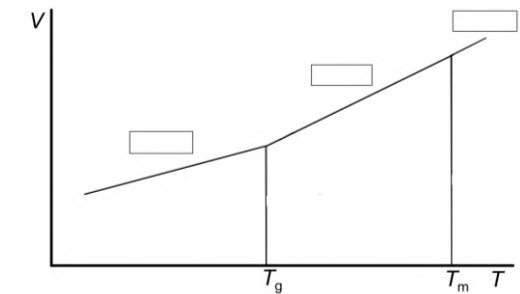


V této úloze se budeme zabývat materiály, které dobře krystalizují, a proto mají široké uplatnění napříč mnoha technologickými odvětvími. Budou nás zajímat chalkogenidová skla. Využívají se například pro výrobu polovodičů nebo optických vláken, kde pravidelná struktura krystalů zaručuje přesný tok elektrického proudu nebo světelných paprsků.

Pod pojmem sklo si asi každý představí okenní tabuli. Klasické sklo je sklo oxidické, vyrábí se z něho například zmíněné okenní tabule nebo skleněné nádobí do kuchyně. Je vyrobeno z oxidu křemičitého s dalšími příměsemi, které mu dodávají dané vlastnosti. V laboratoři jste se nejspíše setkali se sklem borosilikátovým, které má oproti normálnímu sklu lepší vlastnosti zejména za horka. Lidskou činností však byly připraveny i jiné druhy skel. Jako typický příklad můžeme uvést zmíněná chalkogenidová skla.

1. Skla obvykle vznikají ve sklárnách a skláří se nad výrobou nijak nepozastavují. My si ho však popíšeme trochu fyzikálně-chemicky.

- a) Doplňte fázový diagram níže, který popisuje vznik skla z podchlazené taveniny, tj. pojmenujte v něm důležité fáze, které s fázovým přechodem souvisejí.



- b) Vznik chalkogenidového skla je úzce spjat s jeho krystalizací. Zakreslete do nového diagramu, v jakém teplotním intervalu a jak se uplatňuje krystalizace. Zamyslete se, co znamenají teploty T_g a T_m a k čemu při nich v látce dochází. Do tohoto nového diagramu zakreslete křivku změny objemu mezi taveninou a krystalickou fází.

Chalkogenidová skla jsou zvláštní i svým složením, které se výrazně liší od jiných druhů skel. Tato skla tvoří binární sloučeniny s prvky ze stejné skupiny.

2. Napište, o jakou skupinu periodické tabulky jde a jaké prvky tvoří chalkogenidová skla. Napište příklad binární sloučeniny tvořené chalkogeny.

Nyní již víme, s jakými prvky a sloučeninami máme tu čest. Bohužel, chemie těchto sloučenin je trochu složitější, tak v nich můžeme kromě chalkogenů nalézt třeba antimon, nebo dokonce lanthanoidy. Ta jsou však na přípravu složitější, proto se budeme držet skel připravených zejména z chalkogenů.

Typickou vlastností těchto skel je, že jsou schopna propustit záření s delšími vlnovými délkami, zatímco pro viditelné světlo mají nižší propustnost. Tato skla se díky tomu hodí pro aplikace, kde je třeba zajistit průchod záření, které má nižší energii než viditelné světlo. Tento jev je výsledkem jejich chemického složení a vnitřní struktury materiálu.

Praktické využití této vlastnosti je například při výrobě speciálních optických čoček, které umožňují snímání v oblastech, kde se nachází záření s nižší energií.

3. Napište názvy dvou technik, které využívají zmíněné propustnosti v oblastech s nižší energií záření, než má viditelné světlo.

Další ze základních optických veličin je index lomu, který mají tato skla velmi vysoký. Při průchodu záření do skla tak dochází k jeho takzvanému lomu ke kolmici, což pro nás, jako pro chemiky, není nic zajímavého. Tato skla můžeme ale využívat jako difrakční mřížky do optických přístrojů, a to už je pro chemiky zajímavá oblast se širokým uplatněním. Optických přístrojů je dnes celá řada a difrakční mřížky využívají takřka všechny, takže získat levný materiál s požadovanými vlastnostmi by bylo velmi cenné.

4. Jak ovlivňuje vysoký index lomu účinnost difrakčních mřížek a jaké důsledky to má pro rozklad světla v optických přístrojích?

Myslím, že popis materiálu bylo už dost, tak se pojďme vrhnout na jeho přípravu krystalizací. Fyzikálně-chemický popis tohoto děje je totiž také velmi zajímavý a je spjat s řadou dalších oborů.

Krystalizace je velmi složitý a v některých případech časově zdoluhavý proces, který začíná vznikem zárodečných center (takzvaných jader), pokračuje růstem jednotlivých krystalů, popřípadě jejich srůstem, a končí přeměnou celého objemu amorfní látky na krystalickou. Pro náš popis je důležitou fází právě růst krystalů. Ten je závislý na dvou faktorech, kinetickém a termodynamickém. Rychlost růstu můžeme popsat jako jejich součin.

$$u(T) = u_{\text{kin}}(T) \cdot F(T)$$

Termodynamický člen $F(T)$ nám zde určuje, zda bude krystalizace probíhat, či nikoli. Tento člen je závislý na změně Gibbsovy volné energie tuhnutí. Matematicky bychom ho mohli popsat:

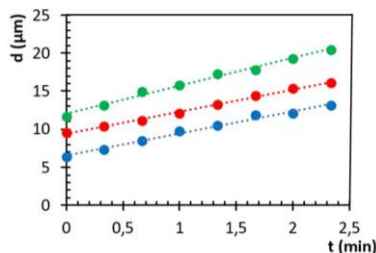
$$F(T) = 1 - \exp\left(\frac{-\Delta G}{RT}\right)$$

Nás bude zatím více zajímat člen kinetický $u_{\text{kin}}(T)$, ze kterého lze vypočítat viskozitu a určuje, jak rychle nám dochází k transportu hmoty do krystalizačních center. Viskozita je závislá na teplotě. Vlivem vzrůstající teploty dochází ke snižování viskozity, z čehož plyne, že když budeme měnit teplotu při experimentu, tak se musí měnit i rychlost růstu krystalů.

5. Vztah pro závislost viskozity na teplotě připomíná jeden vztah z chemické kinetiky, který popisuje teplotní závislost rychlostní konstanty pomocí veličiny aktivační energie. Napište tento vztah (z chemické kinetiky) a jméno člověka, po kterém je tento důležitý vztah pojmenován.

Když už známe teorii krystalizace, můžeme se pustit do jejího studování experimentálními technikami (bohužel pouze teoreticky).

Krystalizace probíhá za vyšších teplot, záleží ale na studovaném vzorku. Některé lze studovat už kolem 100–150 °C, jiné je třeba zahřát až na teploty kolem 300 °C. V praxi to probíhá tak, že vzorek studovaného skla umístíme do termostatu s nastaveným gradientem teploty a sledujeme rychlost růstu krystalů pomocí mikroskopu na obrazovce počítače. Softwarem jsme schopni pořizovat fotografie v daných časových intervalech. Tyto fotografie se následně vyhodnocují a vynášejí se velikost vznikajících krystalů v závislosti na čase. Jak může taková závislost vypadat, pak vidíme na obrázku níže.



Obrázek 1: Závislost velikosti krystalů na čase

Rychlost růstu krystalů pak můžeme najít stejně, jako bychom hledali rychlost rovnoměrného pohybu tělesa, protože obě veličiny mají stejnou závislost na čase. S velikostí krystalů pracujeme stejně, jako bychom pracovali s polohou nebo vzdáleností.

6. Jak byste určili rychlosti růstu z grafu, který vidíte výše?

Když budeme takto postupovat dále, dostaneme hodnoty rychlosti pro několik teplot. Kdybychom se hodně snažili, tak jejich počet bude záviset jen na našem úsilí. To ale pro praktické výsledky není moc vhodné, protože bychom tím strávili příliš času. Popsat rychlosti krystalizace od nějakých rozumných hodnot, řekněme třeba 100 °C, až po teplotu tání materiálu, která může být i přes 600 °C, bychom tak prostě a jednoduše sami nezvládli. Pokud bychom chtěli navíc mít hodnoty,

kteří lze spolehlivě reprodukovat, tak bychom museli měření pro každou teplotu několikrát opakovat a jako rychlost určit pak průměr těchto opakování společně se směrodatnou odchylkou. To už vidíme, že je absolutní nesmysl. Tady nám může přijít na pomoc matematika. Pomocí ní můžeme totiž zaměřit jen několik hodnot a proložit je křivkou, která bude kopírovat jejich trend. Tuto křivku lze extrapolovat (použít její předpis pro další hodnoty) do intervalu, který požadujeme. Pro ilustraci si můžeme ukázat takový graf teoretické sloučeniny X, pro kterou máme simulovaná krystalizační data.



Obrázek 2: Závislost rychlosti růstu na teplotě

Obrázek je takto sice zajímavý, ale jeho měřítko není pro nás moc vhodné. My bychom ho chtěli upravit tak, aby bylo dobře vidět i (velmi) nízké hodnoty. Často pak pracujeme s logaritmickými grafy, jak ukazují otázky níže.

Když se podíváte na graf, vidíte, že ke konci křivka začíná padat dolů. Vysvětlete, proč tomu tak je. Při formulaci odpovědi se zamyslete nad změnou Gibbsovy energie mezi amorfní a krystalickou fází během tání a tuhnutí. Pomocí vám může i rovnice popisující termodynamický člen rychlosti růstu $F(T)$ uvedená výše. Dále se zkuste zamyslet, jestli tento jev lze predikovat ze vztahu z 5. otázky.

Z hodnot rychlosti růstu můžeme také spočítat aktivační energii pro započítání krystalizace. K tomu nám ale graf, jak je uveden výše, nebude moc platný. K jednoduchému vyhodnocení může pomoci zlinearování jinak nelineární křivky.

7. a) Linearizujte zlogaritmováním vztah z otázky 5. b). Pokud jste na ni neodpověděli, můžete zlogaritmováním linearizovat funkci: $k = a \cdot 2^{\frac{b}{c}}$. Předpokládejte, že aktivační energie není závislá na teplotě.
- b) Jak byste vypočítali hodnotu aktivační energie, pokud si odvozený vztah představíte jako rovnici přímky? Pokud jste neodpověděli na otázku 5. b),

jak byste určili parametr b , ze znalosti předpisu funkce výše? Vztah napište¹⁵.

8. Pokuste se z dat v [tabulce¹⁶](#) určit hodnotu aktivační energie. V řešení uveďte též graf, který jste pro řešení vytvořili.

T (K)	u (mm/min)	T (K)	u (mm/min)
671,84	2,539925414	701,48	24,098715
676,78	2,860855	701,48	20,72381649
682,955	3,56704	701,48	28,57122
682,955	3,227025	707,655	33,12219
682,955	4,430155	707,655	27,9435
689,13	16,22606	707,655	32,1919266
689,13	7,045655	707,655	31,7511117
689,13	7,621065	713,83	48,998275
695,305	11,57047	713,83	38,117795
695,305	8,771885	713,83	55,49937978
695,305	10,10579	713,83	53,19328183
701,48	19,83200736		

Aktivační bariéru jsme překonali a narostly nám pěkné krystaly. Jak to ale ověřit, abychom si byli jistí, že celý materiál zkrystalizoval a nemáme tam třeba nějaké amorfní jádro?

Jednou z možností je využití DSC neboli diferenciální skenovací kalorimetrie. My ale raději využijeme možnosti optiky a ohybu světla. Jednou z možností je P-XRD – prášková rentgenová difrakční analýza, která využívá právě ohybu rentgenových paprsků při jejich dopadu na krystalickou mřížku materiálu.

9. a) Vysvětlíte, jak je pomocí rentgenového záření možné určit, jestli je materiál amorfní, či krystalický. Proč to nejde třeba pomocí IR nebo UV záření? Při odpovědi se zamyslete nad vlnovými délkami jednotlivých druhů záření.
- b) Jak se od sebe obvykle liší difraktogramy amorfních a krystalických látek; jinými slovy, jak byste poznali, jestli daná látka je amorfní nebo krystalická?

Doufám, že jste si řešení této fyzikálněchemicko-matematické úlohy užili. Pokud mi budete chtít napsat na úlohu feedback, klidně můžete na konec řešení. Budu za něj moc rád. Díky!

¹⁵ Pokud jste otázku 5. b) vyřešili, ale s tímto úkolem si nejste jistí, můžete nejprve vypočítat parametr b z rovnice výše a hodnotu aktivační energie pak počítat stejným způsobem.

¹⁶ Odkaz na tabulku v Excelu: https://u528-my.sharepoint.com/:x/g/person/jisar_natur_cuni_cz/EcCLJvKK3JpCgFxpEGfUFGbj10OZz6gR5bD8elfwbgAbg?e=FlcCn3

Úloha č. 5: Organická křížovka**(10 bodů)**

Autoři: Jakub Krieger a Tadeáš Grabic

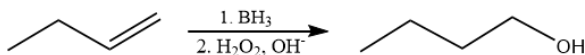
*Fyzikální chemik: „Máme letos málo úloh z organiky.“**Analytický chemik: „Tak napíšeme úlohu z organiky.“**Fyzikální chemik: „OK, let's go! Ale o čem?“**Analytický chemik: \backslash _(ツ)_/*

A tak vznikla křížovka, ve které najdete změř náhodných pojmů, které mají autoři asociované s pojmem „organická chemie“. A taky pár zajímavých reakcí.



1. Pomocí nápověd a) – x) vyluštíte křížovku na následující straně a napište jména tří významných chemiků **I – III**, která se vyskytují v tajence.

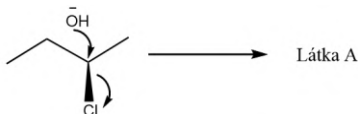
a) Název skupiny reakcí, do které patří reakce 1.



Reakce 1

b) Zkratka pro oblíbené bromační činidlo.

c) Částice OH^- vystupuje v reakci níže (reakce 2) jako „...“.



Reakce 2

d) Název látky **D** ve schématu níže (schéma 1).

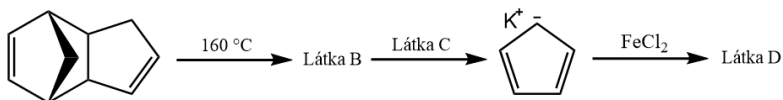
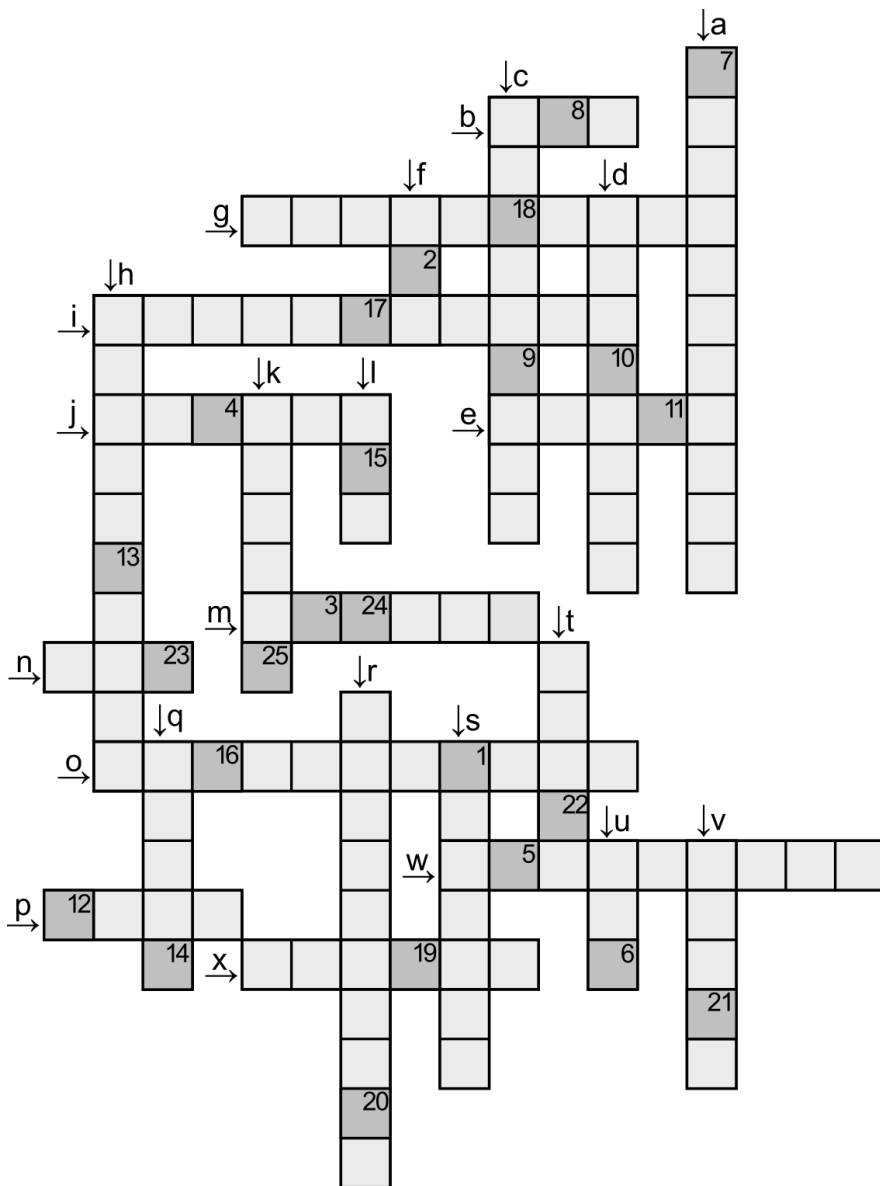


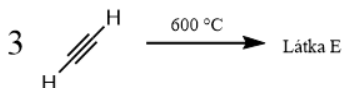
Schéma 1

e) „Podlaha“ anglicky.

f) Zkratka pro enzym odbourávající dopamin a serotonin. Je inhibován EtOH.

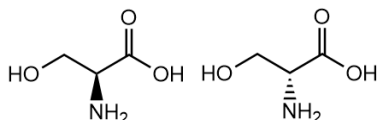


- g) Část molekuly účinné látky léčiva odpovědná za jeho účinek.
 h) Reakce S_N1 a S_N2 se z hlediska mechanismu řadí mezi „...“.
 i) Přístroj umožňující zjistit m/z molekuly se nazývá hmotnostní „...“.
 j) Jaký je název látky **E**, jediného produktu reakce 3?



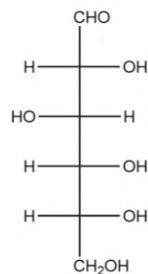
Reakce 3

- k) Jméno chemika, po němž je pojmenováno pravidlo o selektivitě u eliminačních reakcí.
 l) „MRI pro molekuly“.
 m) Látka vzniklá deprotonací molekuly karbonylové sloučeniny.
 n) Na mazání zábrusů se používá Ramsayův „...“.
 o) Jednotlivé optické izomery aminokyseliny F jsou si navzájem „...“.

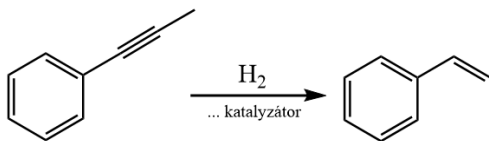


Optické izomery aminokyseliny F

- p) Karbonylová sloučenina (aldehyd či keton) je ve vodném prostředí v rovnováze se sloučeninou nazývanou geminální „...“.
 q) Obchodní označení polyamidu 6.6.
 r) Název projekce, ve které je na obrázku vpravo zakreslena D-glukóza.
 s) Název soli kyseliny malonové.
 t) Název aminokyseliny F (zakreslená v podotázce o).
 u) Zkratka pro dehydratační a couplingové činidlo, z něž při dehydrataci či couplingu vzniká dicyklohexylmočovina.
 v) Název skupiny cyklických uhlovodíků s totální delokalizací π -elektronů.



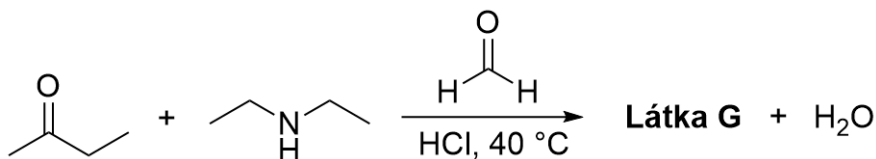
w) Reakci níže (reakce 4) katalyzuje „...“ katalyzátor.



Reakce 4

x) Americký chemik Thomas Midgley Jr. se vlastnoručně zasadil hned o dvě ekologické katastrofy. První z nich bylo prosazení používání tetraethylolova, druhou byl objev „...“.

- Nakreslete produkt reakce 2 – látku **A**. Jde o *R* nebo *S*-izomer?
- Nakreslete strukturní vzorce látek **B**, **C** a **D** ze schématu 1. Náповědou může být, že látka **C** je bázi a látka **D** obsahuje železo. Látky **B** vznikají 2 ekvivalenty. Pro látku **C** existuje více správných řešení.
- Chemik **I** objevil reakci, ve které reagují amin (ne terciární), formaldehyd s povětšinou ketonem či aldehydem. Nakreslete možné produkty (látky **G**, které mohou vzniknout) této reakce mezi butan-2-onem a diethylaminem. Látky reagují v poměru 1:1.



- Jak se jmenuje reakce, kterou objevil chemik **II** roku 1869 a ve které vystupuje látka z nápovědy m) křížovky? Pojmenujte jedním slovem z křížovky, jakou roli tato látka ve zmíněné reakci má.
- Porušuje reakce 1 uvedená v nápovědě a) pravidlo chemika **III**? Odůvodněte regiosektivitu reakce 1 na základě reakčního mechanismu.

Řešení úloh 2. série 23. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Hravě rostlinná

Autorka: Hana Panchártková

(11 bodů)

Část: Fytohormonová křížovka

Poznámka: Do zadání se vloudila chyba. První slovo by správně mělo být „abscisin II“. Za první slovo byly udělovány pouze bonusové body.

[0,3 bodů za každé slovo v křížovce, celkem 1,5 bodu]

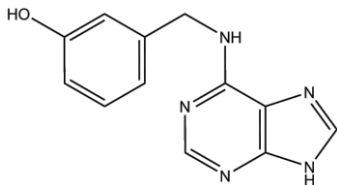
1. b) Za vyšší teploty bude více syntetizovaný abscisin II.

[0,2 bodu]

2. b) Cu; více akceptovatelných odpovědí (plastocyanin, cytochromoxidázový komplex, CuZnSODismutázy, ...)

[0,2 bodu za Cu, 0,3 bodu za zbytek]

3.



4. b)

[0,3 bodu]

5. b) V plastidech, endoplasmatickém retikulu a cytosolu.

[0,3 bodu]

6. b) *Spodoptera* (česky blýskavka).

[0,6 bodu]

Tajenka: Chitin pomáhá rostlinám bránit se proti hmyzu; to bylo myšleno vztahem k úloze, ale jakákoliv smysluplná odpověď bude uznávána.



Definice by mohla znít třeba *polysacharid, vyskytující se v kutikule členovců, tvořící dlouhé řetězce.*

[0,3 bodu za definici a 0,3 bodu za spojení k úloze]

7. 1b 2c 3e 4d 5a

[0,2 za každé správné spojení, celkem 1 bod]

b) neublíží: beta karoten, škrob; ztíží: salvinorin; zabije: kumarin, paklitaxel

[0,2 bodu za každé správné přiřazení, celkem 1 bod]

8. 1Vb 2IIIc 3IIa 4Ie 5IVd

[0,2 bodu za každé správné spojení, celkem 1 bod]

9. a) Děkujeme za Vaše recenze a zaslané fotky.

[1 bod za fotku a 1 bod za recenzi]

b) Působí jako inhibitor chuťových receptorů, čímž způsobuje dojem sladké chuti vody.

[0,3 bodu]

c) Rutin je schopný léčit křehkost krevních kapilár a zvyšovat pružnost cév. Snižuje hladinu LDL cholesterolu. Také je významná jeho antioxidační aktivita a s tím související antikarcinogenní účinky a schopnost zhášet volné radikály. Zesiluje účinek vitamínu C.

[0,3 bodu za název a 0,4 bodu za využití]

d) Allicin reaguje s $-SH$ skupinou v membránových proteinech mikroorganismů.

[0,3 bodu]

e) Anethol. *In vitro* má anethol antihelmintický účinek na vajíčka a larvy ovčího gastrointestinálního hlístice *Haemonchus contortus*. Anethol má také nematocidní aktivitu proti rostlinnému hlístici *Meloidogyne javanica in vitro* a v nádobách se sazenicemi okurek. V zemědělství by anethol bylo možné využít jako pesticid nebo insekticid.

[0,3 bodu za název a 0,4 bodu za využití]

Úloha č. 2: Míchací

(8 bodů)

Autor: Jakub Krieger

1. Body byly uděleny za zaslouanou fotku na e-mailu.

[0,5 bodu]

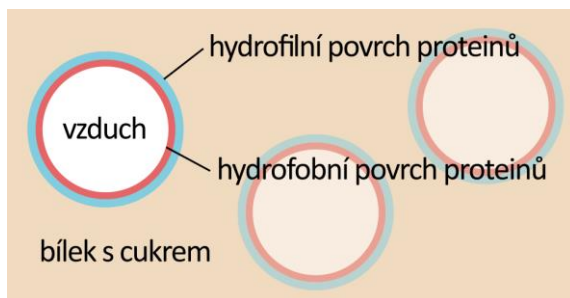
Při míchání bílek *denaturuje*.

[0,25 bodu]

Třetí ingrediencí přidávanou do sněhu je vzduch.

[0,25 bodu]

Struktura sněhu je na Obrázku 1. Proteiny jsou orientovány hydrofilními skupinami do prostoru s bílkem, jelikož vnější strana bublin má trochu větší povrch, což vede k více stabilizujícím interakcím. Cukr má hodně polárních hydroxyskupin, které interagují s polárními skupinami aminokyselin, čímž vzniklou strukturu dále stabilizují.



Obrázek 1: Struktura sněhu z vaječného bílku.

[1 bod za obrázek, 0,5 bodu za cukr, 0,5 za proteiny, celkem 2 body]

Body byly uděleny za zaslouanou fotku na e-mailu.

[0,5 bodu]

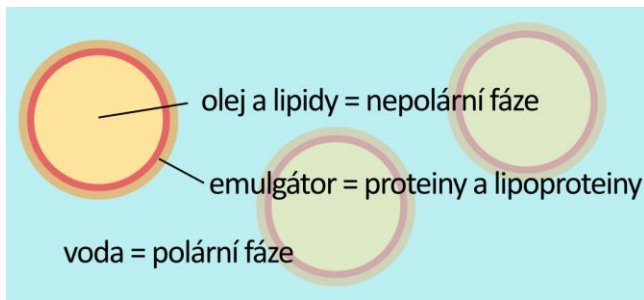
Žloutek na rozdíl od bílku obsahuje hydrofobní lipidy, fosfolipidy (např. lecitiny) a lipoproteiny. Při výrobě sněhu jsme lipidy oddělili, jinak by se měly tendenci vázat na vnitřní stranu bublin místo vzduchu a tím celou strukturu destabilizovat.

[0,25 bodu za lipidy, 0,75 za vysvětlení oddělení žloutku, celkem 1 bod]

Struktura majonézy je na Obrázku 2. Polární fáze představuje fázi, kde se uplatňuje hodně polárních ne vazebných interakcí, zejména vodíkových můstků. Jde o vodné prostředí. Nepochární fáze naproti tomu sestává z nepolárních molekul, kde se

uplatňují nanejvýš van der Waalsovy síly. Emulgátor je látka, které má hydrofobní i hydrofilní část, čímž umožňuje vázat zmíněné dvě fáze k sobě.

Pozor, fáze a složka nejsou synonyma: jedna fáze může obsahovat více složek a naopak jedna složka může být ve více fázích. Složka je dána chemickou identitou, fáze je oblast prostoru s homogenními nebo spojitě se měnícími fyzikálními vlastnostmi.



Obrázek 2: Struktura majonézy.

[1 bod za obrázek, 0,75 za vysvětlení, celkem 1,75 bodu]

Pokud nebudeme přidávat olej opatrně, v určitém bodě množství emulgátoru nebude stačit na to, aby udrželo olej v kapkách. Kapky oleje pak začnou koagulovat (spojovat se), čímž se sníží jejich povrch a klesne množství emulgátoru potřebné na dané množství oleje. Tímto způsobem mohou postupně vznikat větší a větší oblasti oleje, které vnímáme jako zdrcnutí. Podobný jev může nastat lokálně v konkrétních místech směsi, pokud mícháme moc pomalu (respektive přidáváme olej moc rychle).

Pokud je zdrcnutí lokální, tak se ho lze zbavit intenzivním mícháním. Pokud už ovšem bylo přidáno moc oleje, je třeba vyrovnat poměry polární a nepolární fáze, a to buď přidáním dalšího žloutku, nebo například trochy vody.

[0,75 za vysvětlení zdrcnutí, 1 bod za možností záchrany, celkem 1,75 bodu]

Úloha č. 3: Lčiva v průběhu věku II

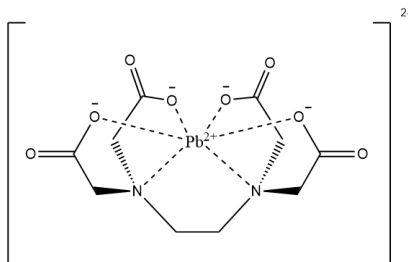
(10 bodů)

Autor: Tadeáš Grabic

1. a) EDTA = **kyselina ethylendiamintetraoctová**

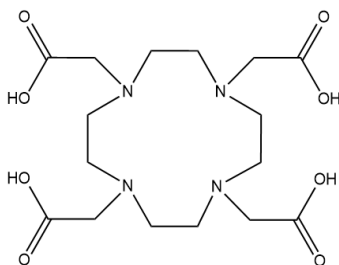
[0,25 bodu]

b) Komplex má tvar deformovaného oktaedru.

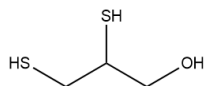


[0,25 bodu - 0,15 bodu za nákres, 0,1 bodu za (deformovaný) oktaedr]

c) Chelatačních činidel je velké množství. Jako příklad lze uvést například BAL (dimerkaprol), který chelatuje As^{3+} či Hg^{2+} , nebo DOTA, který chelatuje Gd^{3+} .



DOTA



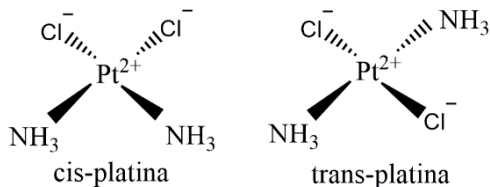
dimercaprol

[1 bod]

a) V intracelulárním prostředí je menší koncentrace chloridových aniontů než v prostřední extracelulárním, a proto je uvolňování Cl^- do prostředí energeticky výhodnější.

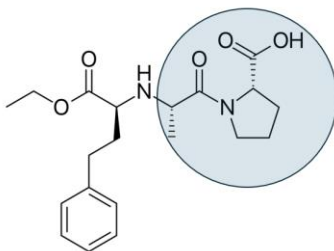
[0,75 bodu]

- b) *Trans-platina* nemá potřebnou prostorovou konformaci, aby dokázala zasíťovat DNA – její případnou reakcí nevznikne charakteristický intravláčkový adukt s guaninem, který zabraňuje replikaci vlákna.



[1 bod]

- a) Bude uznána srozumitelně vyznačená skupina na libovolném uvedeném léčivu či skupina se zbytkem označeným jako R.

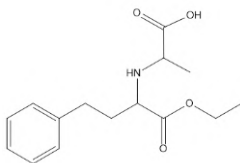


[0,75 bodu]

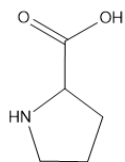
- b) Agranulocytóza je spojena s přítomností thiolové skupiny.

[0,5 bodu]

a)



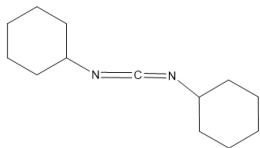
Látka A



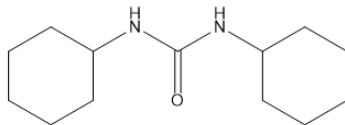
Aminokyselina X = prolin

[0,5 za strukturu látky A; 0,25 za strukturu prolinu a 0,25 za jeho název, celkem 1 bod]

- b) DCC = dicyklohexylkarbodiimid. Během reakce z této látky vzniká dicyklohexylmočovina.



DCC



dicyklohexylmočovina

[0,25 za název DCC, 0,25 za jeho strukturu a 0,5 za dicyklohexylmočovinu, celkem 1 bod]

Tyto látky nazýváme proléčiva, v angličtině *prodrugs*.

[0,25 bodu]

Typickým a častým (naštěstí ne velmi častým) vedlejším účinkem je suchý kašel.

[0,25 bodu]

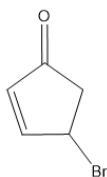
Diabetes mellitus 1. typu vzniká destrukcí beta-buňek slinivky břišní, takže dochází k totálnímu nedostatku inzulínu. Diabetes mellitus 2. typu vzniká postupným znečitlivěním buněčných receptorů na inzulín.

[0,5 bodu]

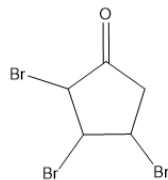
Inzulín patří mezi peptidické hormony, při příjmu perorálně by došlo k jeho naštipání působením proteáz. Vzniklé kratší peptidy postrádají potřebnou funkci.

[0,5 bodu]

a)



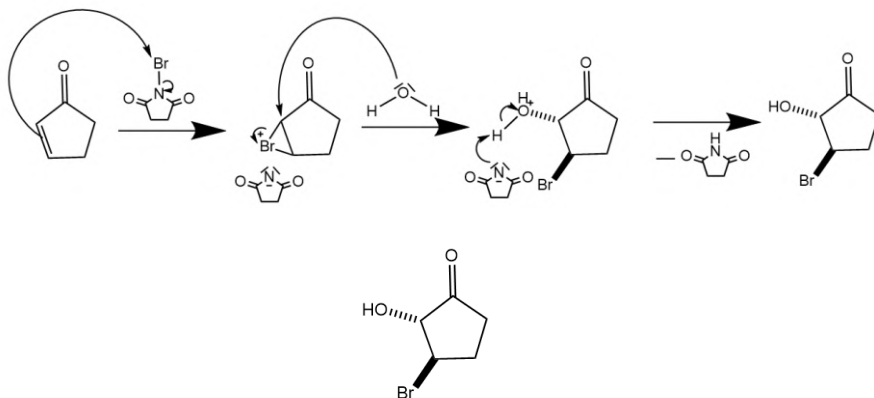
Látka 1



Látka 2

[za každou strukturu 0,25, celkem 0,5 bodu]

b) Namísto radikálové substituce do allylové polohy by došlo k adici na dvojnou vazbu a vzniku bromohydrinu.



[0,5 bodu; při nezakreslení substituentů na opačných stranách cyklu 0,25 bodu]

Hodnocena bude snaha o diskuzi a odhad směru vývoje.

Pro zajímavost: za nejpalcivější problém současné medicínální chemie považují antibiotickou rezistenci a myslím, že vývoj bude pokračovat směrem cílené syntézy látek, které budou funkčními analogy známých látek, avšak pro bakterie budou jejich struktury nové, a tedy na ně nebudou mít vyvinuté obranné mechanismy.

[1 bod]

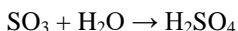
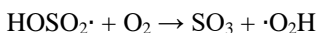
Úloha č. 4: Acidobázická**(10 bodov)**

Autorky: Zuzana Mackovjaková a Sofia Malíková

1. Kyslé dažde sa častejšie vyskytujú v priemyselných oblastiach, pretože továrne a rafinérie spaľujú fosílné palivá, čo vedie k vysokej produkcii oxidov síry a dusíka. Tieto oxidy reagujú so vzdušnou parou a kyslíkom, pričom vznikajú ich príslušné kyseliny (kyselina sírová H_2SO_4 , kyselina dusičná HNO_3). Vo vzduchu sa kyseliny zmiešajú s dažďovou vodou a padajú na zem vo forme práve kyslých dažďov.

[0,5 bodu]

2. $\text{SO}_2 + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{HOSO}_2\cdot$



V prvom kroku reakcie oxid siričitý reaguje s hydroxylovým radikálom ($\text{OH}\cdot$, ten vzniká v atmosfére pôsobením UV žiarenia na kyslík a vodu) za vzniku hydroxylsulfonylového radikálu ($\text{HOSO}_2\cdot$). Ďalej $\text{HOSO}_2\cdot$ reaguje s kyslíkom za vzniku oxidu siričitého a hydroperoxylového radikálu ($\cdot\text{O}_2\text{H}$). V poslednom kroku oxid sírový, ktorý vznikol v predchádzajúcej reakcii, reaguje s vodou (dážď) za vzniku kyseliny sírovej (kyslé dažde).

[za každú reakciu 0,25 bodu, za celý mechanizmus 0,25 bodu, celkovo 1 bod]

3. Koncentráciu H^+ iónov vo vode vypočítame podľa vzťahu $\text{pH} = -\log [\text{H}^+]$:

$$[\text{H}^+]_2 = 10^{-\text{pH}} = 10^{-5,7} \approx 1,95 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$$

$$\text{Počiatočná koncentrácia: } [\text{H}^+]_1 = 10^{-\text{pH}} = 10^{-7} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$$

$$\text{Zmena koncentrácie: } \Delta[\text{H}^+] = [\text{H}^+]_2 - [\text{H}^+]_1 = 1,95 \cdot 10^{-6} - 10^{-7} = 1,85 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$$

$$n(\text{H}^+) = \Delta[\text{H}^+] \cdot V = 1,85 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot 5 \cdot 10^4 \text{ dm}^3 = 0,0925 \text{ mol}$$

Rovnica: $\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow 2\text{H}^+ + \text{SO}_4^{2-} \dots n(\text{H}_2\text{SO}_4) = \frac{n(\text{H}^+)}{2}$ (predpokladáme úplnú disociáciu silnej kyseliny, pretože vysoký objem vody umožňuje, aby sa rozptýlili disociované ióny do väčšieho priestoru, čím sa znižuje pravdepodobnosť ich opätovného zlúčenia na H_2SO_4)

$$m(\text{H}_2\text{SO}_4) = n(\text{H}_2\text{SO}_4) \cdot M(\text{H}_2\text{SO}_4) = \frac{0,0925 \text{ mol} \cdot 98,079 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{2} = 4,54 \text{ g}$$

[za výpočet pH 0,5 bodu, za výpočet hmotnosti 1,5 bodu, celkovo 2 body]

4. Oxid uhličitý je absorbovaný do oceánov, kde reaguje s molekulami vody za vzniku hydrogénuhličitanových aniónov a vodíkových katiónov, ktoré sú zodpovedné za pokles pH. Teda zvyšovaním hladiny CO₂ sa tvorí väčšie množstvo kyseliny a pH oceánov tak klesá.

[0,5 bodu]

5. Okysľovanie oceánov znižuje množstvo uhličitanov (CO₃²⁻) vo vode, ktoré využívajú morské organizmy (koraly, mäkkýše) na tvorbu schránok a kostier. Acidita taktiež samotné schránky poškodzuje. To následne postihuje ďalšie živočíchy, ktoré sa práve týmito organizmami živia. Zmeny pH môžu tiež spôsobiť migráciu planktónu smerom k pólom a nerovnováhu v druhej rozmanitosti fytoplanktónu, keďže niektoré druhy fytoplanktónu pri raste acidity postupne vymierajú, zatiaľ čo iné narastajú na populácii.

[za každý mechanizmus 0,5 bodu, celkovo 1,5 bodu]

6. CO₂ + H₂O ⇌ H⁺ + HCO₃⁻



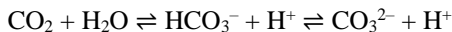
Medzi týmito reakciami dochádza rýchlo k dynamickej rovnováhe a vytvára puľovací systém pre kontrolu pH oceánskej vody. Z oxidu uhličitého absorbovaného vodou sledom reakcií vzniká uhličitanový ión, ktorý spätne zachytí voľné vodíkové katióny spôsobujúce pokles pH. Hlavným iónom je pri momentálnom pH oceánov (≈ 8,1) HCO₃⁻, v menšom množstve sa však tvorí aj CO₃²⁻.

[za rovnice 0,25 bodu, za vysvetlenie 0,75 bodu, celkovo 1 bod]

7. Výpočet pH podľa Henderson–Hasselbalchovej rovnice:

$$\text{pH} = \text{p}K_a + \log \left(\frac{[\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]} \right) = 10,3 + \log \left(\frac{0,1}{20,4} \right) \approx 8$$

Výpočet hmotnosti:



$$n(\text{CO}_2) = n(\text{HCO}_3^-) + n(\text{CO}_3^{2-}) = [c(\text{HCO}_3^-) + c(\text{CO}_3^{2-})] \cdot V_{\text{oceán}} = (0,0204 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} + 0,0001 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}) \cdot 1,335 \cdot 10^{21} \text{ dm}^3 = 2,737 \cdot 10^{19} \text{ mol}$$

$$m(\text{CO}_2) = n(\text{CO}_2) \cdot M(\text{CO}_2) = 2,737 \cdot 10^{19} \text{ mol} \cdot 44,01 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$m(\text{CO}_2) = 1,20 \cdot 10^{21} \text{ g} = 1,20 \cdot 10^{15} \text{ t}$$

[za výpočet pH 0,5 bodu, za výpočet hmotnosti 1,5 bodu, celkovo 2 body]

8. Najčastejšie sa vyskytujúce alkalické ióny v prírodných vodných zdrojoch sú HCO_3^- a CO_3^{2-} sprevádzané kovovými iónmi, napr. Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ . Alkalický charakter látok pozitívne prispieva napríklad ku regulácii a stabilite pH vôd, dodávaniu živín morským organizmom, čo podporuje biodiverzitu rastlín a živočíchov vo vodných ekosystémoch. Okrem tohto alkalita iónov dokáže zlepšovať podmienky pre priebeh fotosyntézy morských rastlín a chrániť vodný ekosystém pred škodlivými účinkami kyslých dažďov.

[za určenie iónov 0,25 bodu, za vysvetlenie 0,5 bodu, celkovo 0,75 bodu]

9. Zvetrávanie je kľúčový proces, ktorým prechádzajú ióny do pôdy, menia jej chemické zloženie, a tým ovplyvňujú jej chemické vlastnosti, ako je napríklad jej alkalita. Počas zvetrávania sa najčastejšie do pôdy uvoľňujú napr. vápenaté, horečnaté, uhličitanové a hydrogénuhličitanové ióny. Tieto ióny poskytujú pôde esenciálne živiny, pomáhajú regulovať a stabilizovať jej pH, čo vo výsledku zvyšuje úrodnosť pôdy.

[za každú podotázku 0,25 bodu, celkovo 0,75 bodu]

Problem No. 5: Grüße aus Wien, Teil 1

(12 points)

Author: Vít Novotný

1. AIDS, EBOLA, SARS-CoV-2

[0.1 p per each, 0.3 p in total]

2. The blood group system.

[0.4 p]

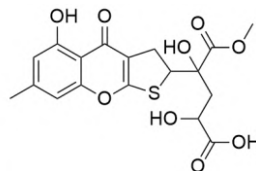
3. Monosaccharides are metabolised fast. In the body, mannose would get metabolised before it could approach its target. For their mobility, drugs also need the ability to cross lipid membranes. Monosaccharides, however, are too hydrophilic; their transmembrane transport is regulated.

[0.5 p for discussing the low stability, 0.5 p for discussing the limits of transport, 1 p in total]

4. Lactose E); melatonin B); cortisol D); acetylcholine A); adenosine C).

[0.3 p per each, no penalization, 1.5 p in total]

5. For detailed explanation (not examinable), A) is carbachol used for acetylcholine receptors activation in medicine; B) is ramelteon, a melatonin agonist for insomnia treatment; C) is 6-benzylaminopurine, a synthetic adenine-type cytokinin used for postharvest shelf life extension; D) is dexamethasone, a glucocorticoid used for immune system suppression; E) is IPTG, lactose mimics for lac-operon activation.



The author chose oxalicumchromone D from marine fungus *Penicillium oxalicum*. This chromone causes

the apoptosis of leukaemia cells.

[0.75 p in total, 0.25 subtracted for missing information]

6. a) Via plasmids, bacteria can share genetic information among other members of their population. The population therefore adapts to environmental changes and communicates, typically obtaining antibiotic resistance or ability to cope with competitors. Opposingly, a bacterial chromosome is completely inherited after asexual reproduction.

[0.75 p]

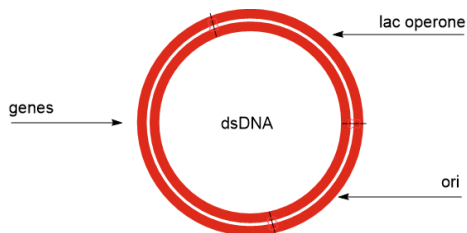
b) **Origin of replication** (*ori*) is the place where appropriate enzymes can begin transcription of the plasmid.

Lac operon works like a switcher – genes are not expressed until lactose (or its mimic IPTG) is added. *For further explanation: Expression of an artificial protein slows down the proliferation of bacteria. Therefore, it is better to let the population grow first and then switch on the expression.*

Proliferation of other than mutated bacteria is not desired. Thus, the bacteria grow in an antibiotic medium and a **gene ensuring antibiotic resistance** is added to the vector.

[0.5 p per explanation of each plasmid part, 1.5 p in total]

c) Plasmid is circular double-stranded (ds) DNA.



[0.5 p]

7. ii. – Although *E. coli* is gram-negative, gram-negative bacteria do not produce extreme toxins; this applies to gram-positives like *Clostridium botulinum* responsible for botulism.

iv. – *E. coli* does not perform splicing, since it is a bacterium.

*To provide you with a further explanation, prokaryotic cells transcribe DNA directly to mRNA which is immediately translated to a protein. On the contrary, eukaryotic cells transcribe DNA to pre-mRNA which contains non-coding regions, introns. Spliceosomes then remove introns to create mRNA prepared for translation. Consequently, plasmids inserted to *E. coli* must not contain introns; they cannot be prepared directly from the human gene for DC-SIGN.*

[1 p per each explained right choice, 0.75 p per unexplained, 2 p in total]

8. Endoplasmic reticulum, Golgi apparatus.

Glycosylation is governed by enzymatic possibilities of a cell rather than by the gene for the protein, so *Saccharomyces cerevisiae* performs the glycosylation differently than human cells performing splicing, since it is a fungus.

[0.3 p per each organelle, 0.6 p for explanation, 1.2 p in total]

9. a) His-tag. Sequence of 6 to 14 histidines is added to the protein's primary structure. Histidine's side chain is imidazole, which creates a complex with immobilised Ni^{2+} cations. The complexation provides the desired retention.

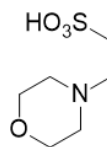
[0.6 p]

- b) Imidazole is added. Concentration of imidazole is higher than that of the protein, so imidazole replaces the protein and forces it to elute.

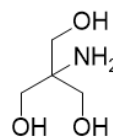


[0.6 p]

10. a) The active compound of the MES is 2-(N-morpholino)ethanesulfonic acid (MES), for TBS it is tris.



MES



Tris

[0.25 p per each structure, 0.5 p in total]

- b) The pH of a tris solution is significantly temperature-dependent. Under the given conditions, the pH increases about 1 unit, and addition of HCl is needed before use. MES is pH thermostable.

[0.25p per each answer, 0.5 p in total]

Points: 1 - 0.3 p; 2 - 0.4 p; 3 - 1 p; 4 - 1.5 p; 5 - 0.75 p; 6 - 2.75 p; 7 - 2 p; 8 - 1.2 p; 9 - 1.1 p; 10 - 1 p; 12 p in total.

Zajíček chemik

