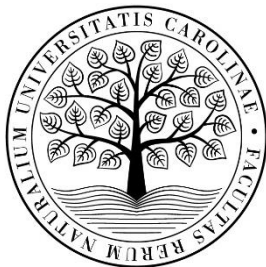




Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 18 (2019/2020)

Série 1



Chemie je všude: je ve vodě, je v půdě, je ve vzduchu a je i v nás samotných. Veškeré materiály jsou tvořeny chemickými látkami, chemické reakce nám každodenně pomáhají s tvarováním světa kolem nás a biochemické reakce nás vlastně utvářejí: katalytické reakce umožňují každodenní běh našich těl, neurotransmitery jsou nositeli našich emocí a naše DNA může dát vzniknout novým generacím. Avšak bez porozumění tajemným nebezpečnostvům s chemií spojeným jsme jí vydáni napospas, proto stojí za to ji poznat blíže a hlouběji, aby se stala naším dobrým sluhou a ne obávaným pánem.

Proč řešit KSICHT?

Milí řešitelé, KSICHT je zde již 18. 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 kupu 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 *Velká chemická datová revoluce*, jehož název mluví za vše. V neposlední řadě můžete v každé brožurce sledovat osudy skutečně neohroženého komiksového hrdiny, a sice Zajíčka chemika.

V průběhu ročníku KSICHT pořádá 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 získávají úspěšní řešitelé i možnost prominutí přijímacích zkoušek na PřF UK a Univerzitě Palackého v Olomouci¹, a ti nejúspěšnější z vás mohou dosáhnout na motivační stipendium na PřF UK nebo VŠCHT.

¹ KSICHT je brán jako předmětová soutěž v chemii podobná olympiádě.

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 PDF.² Pro kreslení chemických vzorců doporučujeme používat programy dostupné zdarma: MDL ISIS/Draw, ChemSketch (freeware s povinnou registrací) nebo Chemtool.

Vypracované řešení úlohy odešlete organizátorům nejpozději do data uvedeného na následující stránce elektronicky nebo papírově (rozhoduje čas na serveru KSICHTu či datum poštovního razítka).

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

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

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

Letáček

Přiložený letáček prosím vyvěste na viditelné místo ve vaší škole, aby si ho mohli prohlédnout všichni studenti. Děkujeme.

Podzimní výlet s KSICHTem

15. až 17. listopadu proběhne první výlet tohoto ročníku, který již pro vás intenzivně připravujeme. Nezapomeňte proto sledovat webové stránky,³ kde se brzy objeví konkrétní informace.

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

³ <https://ksicht.natur.cuni.cz/akce-ksichtu>

**Termín pro odeslání řešení 1. série:
4. 11. 2019**

Elektronicky (PDF)	Papírově
http://ksicht.natur.cuni.cz/ odeslani-resi	KSICHT Přírodovědecká fakulta UK Hlavova 2030 128 43, Praha 2

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 ověříš.⁴
4. Nezkopíruješ **Wikipedii** českou ni anglickou ni v jazyku jiném psanou.⁵
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 svého.⁶
9. Nepožádáš o řešení bližního svého.
10. KSICHTí jméno důsledně šířiti budeš.

⁴ 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.

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. Zejména u internetových zdrojů je třeba každý zdroj kriticky zhodnotit: zdaleka ne každá stránka, příspěvek na blogu či diskusním fóru obsahuje pravdivé informace.

⁶ Tzv. kalkulátorový syndrom: „Svět byl stvořen za 6,999999999942 dní.“ Toto není ani správná, ani přesná hodnota.

Úvodníček

Drahé Ksichtáčky, drazí Ksichtáci,

Po tradiční letní odmlce vás všechny znovu vítáme u nového ročníku KSICHTu. Když někdy kolem roku 1666 Isaac Newton poprvé posvítíl paprskem světla na svůj nový skleněný hranol, ani v nejzapadlejším koutku jeho geniální mysli ho nejspíš nenapadlo, že právě odhaluje něco tak důležitého, jako jsou témata našich úloh. Skutečně je tomu tak: spojujícím motivem naší první série jsou totiž barvy.

Hned první z nich je barva s aristokratickou vlnovou délkou ležící mezi 450 a 495 nanometry. Je to barva rozptýleného slunečního světla, barva rozříznutého hříbu kováře i barva neexistující trasy pražského metra. Tato barva dala název hudebnímu stylu i tvůrčímu období Pabla Picassa. Slovy klasika: modrá je dobrá a stejně taková je i naše první úloha. Hned v závěsu za ní pak následuje úloha, která je k ní barevně komplementární. Stejně jako při pohledu na vzácný poklad i při řešení této úlohy pocítíte hřejivé teplo o vlnové délce 575–585 nm, které odpovídá také barvě svitu hvězd spektrální třídy G. S každým přečteným odstavcem jejího zadání se před vámi pak postupně odhalí vůně zralých banánů, citronové kůry, a nakonec i čerstvě utržených narcisů. Když se však z ničeho nic objeví i podivná kombinace krouhaného červeného zeli a kvetoucí levandule, dojde vám, že text zadání zřejmě volně přešel do úlohy třetí. Její vlnová délka se nachází v rozmezí 380 a 450 nm a díky své vzácnosti je od pradávna považována za barvu královskou. Adoptovali ji také mnozí představitelé univerzit, zřejmě proto, aby si dodali na vznešenosti. Při řešení naší úlohy se však sami přesvědčíte, že někdy k důkladnému vybarvení ve zcela jiném světle postačí i drobná změna prostředí. Své by o tom mohla ostatně říci i barva z úlohy čtvrté, která je na jedné straně spojována láskou mezi lidmi a na straně druhé je symbolem politických hnutí, které před láskou dávaly přednost spíše lidské krvi. Její vlnová délka je 625–740 nm a od nepaměti v sobě důstojně nese stěží uvěřitelnou směs agresivity a zákazu, ale i erotiky, a dokonce i vánoční nálady. No a protože vědecká práce rozhodně nebývá pohádka, nenásleduje po jejím konci zvonec, ale spíše vědecká publikace. V naší poslední úloze si můžete její tvorbu vyzkoušet nanečisto, přesněji za soutěžní body. Nebojte se u jejího sepisování popustit uzdu své fantazii, protože pouze ten, kdo věří na magii, může vykouzlit zázraky.

S pozdravem za autorský kolektiv

Honza Havlík

Zadání úloh 1. série 18. ročníku KSICHTu**Úloha č. 1: Modrá**

Autorka: Tereza Dobrovolná

(11 bodů)

Na louce kvetou chrpy, vlčí máky a kopretiny. Včelky na ně sedají a sklízí pyl. Sem tam kolem proletí velký motýl, napije se z voničích květů a pak mávne křídly a zmizí. Slyšet je jen ptačí zpěv, rychlé nožky mravenců a ještě takový podivný zvuk. Jako by někdo jezdil tužkou po papíře. A taky ano! Myška Cestovatelka sedí v trávě se Zajíčkem Chemikem, každý drží v pacičkách pastelku a soutěží, kdo ve čtyřsměrce najde více slov.



Stav je vyrovnaný, zbývá najít poslední slovo...

1. Ve čtyřsměrce najdete slova spojená s modrou barvou.

Do řešení napište tajenku.

Ř	D	O	M		Á	K	S	T	P	Y	G	E	N	A	K	N	Ž	O	B
A	L	U	O	M	Š	N	A	K	N	Ě	N	M	O	P	E	E	Í	C	G
T	U	R	N	B	U	L	L	O	V	A		M	O	D	Ř	L	L		R
V	Á	V	O	R	U	Z	A		A	K	Č	I	N	S	E	L	A	R	P
Í	T	H	E	M	O	C	Y	A	N	I	N	B	O	R	Ů	V	K	A	A
A	K	T	S	E	V	Š	Ě	Z	Í	T	S	U	O	K	N	I		M	V
Y	G	I	E	M	S	O	V	O		B	A	R	V	E	N	Í	Š	K	I
A	,	E	I	Z	N	E	T	R	O	H		Z	A	J	V	O	D	A	N
Í	M	E	T	H	Y	L	E	N	O	V	Á		M	O	D	Ř	Č	K	O
A	L	O	Z	N	O	G	R	O	G	V	I	C	E	N	E	Ř	D	O	M
R		M	S	E		M	O	D	Ř	I	N	A	Z	T	I	R	U	Z	A
A	I	N	D	I	G	O	L	O	K	E	S	Á	R	D	O	M	M	I	L
T	M		N	E	B	E	M	O	D	R	Á		S	K	A	L	I	C	E
A	O	0	A		P	K	Á	R	D	O	M	L	U	M	I	N	O	L	A
V	Ř	7	S	Ř	D	O	M		Á	K	S	N	Í	L	R	E	B	T	E
A	E	4	K	Y	M	C	L	C	H	R	P	A	K	C	E	Ř	O	H	A

Myška je velká umělkyně. Ráda maluje olejovými barvami, které mají na obalu napsáno „berlínská modř“.

Jednou byla Myška Cestovatelka zvědavá a našla si, že berlínská modř je tmavě modrý komplex vznikající reakcí žluté krevní soli $K_4[Fe(CN)_6]$ s Fe^{3+} ionty. Látkou s podobným vzorcem je modř Turnbullova, což je komplex připravený reakcí červené krevní soli $K_3[Fe(CN)_6]$ s Fe^{2+} ionty.

2. Zapište přípravu berlínské modři vyčíslenou iontovou rovnicí. Kde se kromě výroby barev a inkoustů tato reakce využívá?

Myšku ještě zaujaly krevní soli. Zjistila, že se jedná o barevné komplexní sloučeniny železa.

3. Proč se jim říká krevní soli?

Červená krevní sůl je na rozdíl od žluté toxická. Po požití reaguje s kyselinou chlorovodíkovou přítomnou v žaludku, čímž se uvolňuje nebezpečný kyanovodík.

4. Reakci s HCl zapište chemickou rovnicí, nezapomeňte ji vyčíslit.

Myška Cestovatelka kamarádí se Zajíčkem Chemikem. Jednou se zatoulala do jeho chemické laboratoře. Na podlaze byl rozsypaný krásně oranžový prášek $K_3[Fe(CN)_6]$. Myška si myslela, že je to pomerančový vitamín a část prášku snědla. V žaludku se jí pak uvolnilo 40 μ g HCN.

5. Kolik červené krevní soli snědla za předpokladu, že reakce probíhá úplně a v žaludku je dost kyseliny? A kolik mg prášku by ještě musela sníst, aby se otráвила? Myška váží 45 g. Smrtná dávka $K_3[Fe(CN)_6]$ pro myš je 3 mg na kg tělesné hmotnosti.

$$(M(\text{HCN}) = 27,026 \text{ g mol}^{-1}; M(\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]) = 329,24 \text{ g mol}^{-1})$$

Myška Cestovatelka chodí k Zajíčkovi Chemikovi každý pátek na čaj. Povídají si vtipy. Nejraději mají ty o hlemýždích, třeba tenhle: „Co mají společného princezna a šnek? Modrou krev.“

Modrá barva šnečí krve (přesněji hemolymfy) je způsobena přítomností hemocyaninu, což je metaloprotein přenášející molekuly kyslíku.

6. Jaký kov obsahuje? A jaké je jeho oxidační číslo?

7. Který živočich kromě hlemýždě má v hemolymfě hemocyanin?

Myška by moc chtěla bydlet ve své vlastní uliti jako šneci, zatím jí ale žádná nenarostla, a tak bydlí v kapse starého modrého kabátu.

Modrým barvivem, kterým se barví textilie, je indigo.

8. Napište přípravu indiga z 2-nitrobenzaldehydu a acetonu. Jak se tato jmenná reakce nazývá?

Myška Cestovatelka si nedávno četla v časopisu *Nature* článek o tropických deštných lesích. Moc se jí líbily pralesničky. Jsou to malé barevné žabky žijící v Jižní Americe, které jsou známy jako prudce jedovaté šípové žáby. Domorodci je chytají, do jejich jedu máčí hroty šípů a loví zvířata.

9. Proč zvíře zasažené šípem zemře na otravu, kdežto domorodec po uloveném obědě nikoli?
10. Je zajímavé, že žáby chované v zasetí toxické látky postrádají. Jak je to možné?

Myška je vášnivá cestovatelka a moc by se chtěla seznámit s pralesničkou azurovou. Vrazila proto se svou myší rodinou na výlet do Brazílie. Během putování pralesním podrostem je zpozorovala skupina hladových indiánů.

11. Jaké množství čistého pumiliotoxinu, jedu pralesniček, je potřeba k otrávení celé rodinky 10 myší? Každá myš váží 45 g. Smrtelná dávka pro myš je $2,5 \text{ mg kg}^{-1}$.

Domorodci jsou dobří lovci. Pravděpodobnost, že trefí kořist, je pro každý vystřelený šíp 60 %.

12. Jaká je pravděpodobnost, že při vystřelení 10 šípů dvakrát minou, a trefí tedy pouze 8 myší? A jaká je pravděpodobnost, že mezi zabitými jedinci bude Myška Cestovatelka?

Je pátek. Zajíček Chemik sedí jako každý týden ve svém křesle, před sebou má na stole dva hrnečky a z čajové konvice pomalu uniká pára. Zajíček smutně kouká na dveře. A najednou někdo bere za kliku...

Úloha č. 2: Žlutá

(7 bodů)

Autorka: Tereza Gistrová



Jak aurum z vody připravit:

Plumbum dulcis v menším množství vody rozpustí a na mírném ohni povar. Čerstvé kalii iodidum rovněž ve vedlejší nádobě s vodou smíchej a k varu přiveď. Abys zašednutí zabránil, k oběma pár kapek lučavky přidej. V průzračné nádobě směsi za horka slij. Posečkej následně, cesta ke kovu cennému skrz pomalé ochlazení vede.

1. Byli staří alchymisté schopní tímto postupem zlato skutečně připravit? A co má tento text společného s obrázkem v úvodu?
2. Na co byste si měli dát pozor, pokud byste se rozhodl tento alchymistický experiment provádět doma? (Důrazně to nedoporučujeme.)
3. Všechny sloučeniny zmiňované v úvodu zapište vzorcem, pojmenujte podle dnešního chemického názvosloví a popsany děj zapište chemickou rovnicí. O jaký typ reakce se jedná?

Příčinou efektu pozorovaného při tomto pokusu je mimo jiné i rozdíl rozpustnosti za různých teplot. U většiny sloučenin se při ochlazení snižuje rozpustnost, a tudíž začínou z roztoku krystalizovat. Pokud necháme roztok stát a rozpouštědlo samovolně odpařovat, jedná se o tzv. volnou krystalizaci. Při prudkém ochlazení například pod proudem studené vody nebo ponořením do ledové lázně se jedná o krystalizaci rušenou.

4. Rozpuštěním 66,0 g látky označované jako kalii iodidum ve vodě byl připraven roztok nasycený při teplotě 20 °C. Vypočítejte hmotnost vody, která se musí odpařit, aby bylo volnou krystalizací získáno 42,0 g krystalů. Rozpustnost kalii iodidum při teplotě 20 °C je 144,0 g na 100 g vody.
5. V blíže nespecifikovaném množství destilované vody bylo rozpuštěno 225 g K_2CrO_4 . Odpařením přebytečné vody byl při 100 °C roztok zahuštěn na nasycený. Následně je potřeba provést rušenou krystalizaci ochlazením na teplotu 20 °C, odebrat vysrážené krystaly K_2CrO_4 a celý proces ještě jednou zopakovat. Za předpokladu, že nedochází ke ztrátám, vypočítejte:
 - a) hmotnost, na kterou se zahustí roztok před první krystalizací,
 - b) hmotnost krystalů, které se vyloučí při první krystalizaci,
 - c) hmotnost, na kterou se zahustí roztok před druhou krystalizací a
 - d) hmotnost krystalů, které se vyloučí při druhé krystalizaci.

Rozpustnost K_2CrO_4 na 100 g vody je 79,2 g při 100 °C a 62,9 g při 20 °C.

6. Reakcí sloučeniny označované jako plumbum dulcis a výše zmiňovaného chromanu draselného dostaneme rovněž látku žluté barvy. Reakci запиšte rovnicí a toto barvivo pojmenujte. K čemu se využívá?

Z předchozích příkladů vidíme, že ne všechny soli se rozpouštějí stejně. Tuto vlastnost můžeme popsat pomocí součinu rozpustnosti, který je pro danou látku v rozpouštědle za standardních podmínek konstantou. Součin rozpustnosti (někdy také produkt rozpustnosti) pro disociaci $A_aB_b (s) \leftrightarrow [A]^a (aq) + [B]^b (aq)$ je definován jako:

$$K_S(AB) = [A]^a \cdot [B]^b$$

7. a) Vypočítejte rozpustnost stříbrných halogenidů (v mol · dm⁻³), znáte-li:

$$K_S(\text{AgCl}) = 1,6 \cdot 10^{-10}$$

$$K_S(\text{AgBr}) = 6,3 \cdot 10^{-13}$$

$$K_S(\text{AgI}) = 1,5 \cdot 10^{-16}$$

b) Který anion byste použili pro nejefektivnější kvantitativní stanovení stříbrných kationtů a z jakého důvodu? Jak byste od sebe tyto halogenidy (vzniklé přidávkem Ag^+ do roztoku halogenidu) rozlišili při kvalitativním stanovení?

c) Proč nebyla uvedena konstanta pro AgF ?

Předchozí sloučeniny byly spíše rozjezdové, abyste si osvojili základy počítání s rozpustností. Ne všechny soli jsou však tvořeny pouze jedním kationtem a jedním aniontem, ne vždy vám dané konstanty někdo uvede v zadání a málokdy máme ve vodě rozpuštěnou pouze jednu sůl. Postupně se tedy podívejme na všechny tyto záludnosti.

8. I když někomu mohou halogenidy stříbrné připadat jako poměrně málo rozpustné sloučeniny, najdou se i soli s ještě výrazně menšími součiny rozpustnosti. Takovými jsou například fosforečnan vápenatý ($K_S = 1,8 \cdot 10^{-26}$), sulfid měďný ($K_S = 2,0 \cdot 10^{-47}$) nebo sulfid bismutitý ($K_S = 1,6 \cdot 10^{-72}$). Vypočítejte jejich rozpustnosti (opět v mol dm⁻³) a hodnoty porovnejte s výše spočtenou rozpustností halogenidů stříbrných.
9. Soly se vyskytovaly už v samotném úvodním textu úlohy. Vyhledejte si potřebné konstanty a spočítejte rozpustnost těch sloučenin z alchymistického zadání, pro které to dává smysl.
10. Rozpustnost solí se liší, pokud je nepřidáváme do čisté vody, nýbrž do roztoku jiné soli. Jak se změní rozpustnost AgCl , pokud jej budeme sypat do roztoku solanky o koncentraci 0,1 mol dm⁻³?

Úloha č. 3: Fialová

(10 bodů)

Autoři: Tereza Dobrovolná, Jan Hrubeš



Zajíček Chemik se rozhlíží po kuchyni a přemýšlí. Co dobrého si uvařím k obědu? Mrkvovou polévku? Ne, tu jsem měl minulý týden. Co třeba rajčatový salát? Ne, chybí mi pepř. Očka mu běhají po jednotlivých políčkách a zastaví se u červeného zelí. To je ono! Ale celou hlávkou přece nesním sám... Pozvu Myšku Cestovatelku, usmažíme si zelné placky, zbylé listy vylouhujeme a vytvoříme si vlastní barevnou stupnici pH a indikátorové papírky!

Mnohé látky mohou měnit své vlastnosti v závislosti na prostředí, v němž se právě nacházejí. Jedním z faktorů, který tu hraje zásadní roli, je kyselost roztoku.

1. Napište a vysvětlete vztah pro veličinu, s jejíž pomocí definujeme kyselost (nebo bazicitu) vodného roztoku.

V chemii je důležité nejen znát kyselost roztoků, s nimiž pracujeme, ale také jí moci měnit, nebo naopak udržovat. K udržení stálého pH roztoku i po přidání kyseliny nebo zásady se s výhodou využívá takzvaných pufrů.

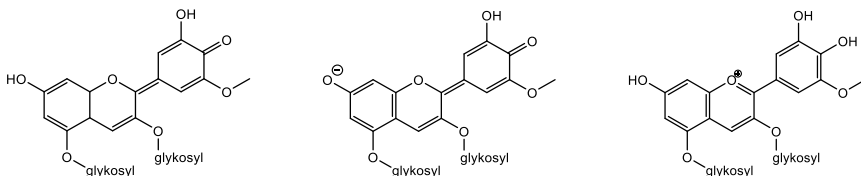
2. Napište, z čeho se pufr skládá, a uveďte dva příklady běžně používaných směsí.

Jednou z vlastností, která na kyselosti prostředí může záviset, je barva roztoků zkoumaných látek.

Antokyany jsou rostlinné pigmenty, které způsobují barevnost pomněnek, máků, růží, borůvek, černého rybízu či červeného zelí. Jejich vodné roztoky mohou hrát snad všemi barvami duhy; jedna látka totiž může mít i čtyři barevné formy!

3. Přiřaďte níže uvedené formy antokyanu k prostředí, ve kterém bude jejich zastoupení největší.

a) kyselé, b) neutrální, c) zásadité prostředí



Obrázek 1: Strukturální vzorce různých forem antokyanu

Protože se protonovaná forma antokyanů barevně liší od deprotonované, lze je používat jako acidobazické indikátory. V zásaditém prostředí bývají zelené, v kyselém červené.

4. Vytvořte si vlastní barevnou stupnici pH a indikátorové papírky. Jak na to?

- Sestavte si stupnici pH (nemusí být úplná, měla by ale obsahovat alespoň pět vzorků). Jako standardy použijte doma běžně dostupné suroviny, jako jsou například ocet, mýdlová voda a podobně. Na pomoc Vám posíláme několik univerzálních indikátorových papírků pH, které si nastříhejte na menší kousky. S jejich pomocí stanovte pH použitých surovin a uveďte je do řešení.
- Připravte si výluh z červeného zelí: malou hlávkou červeného zelí nejmenno nakrouhejte, zalijte asi 100 mL vody a pořádně promačkejte. Směs přefiltrujte přes cedník.
- K připraveným vzorkům vybraných surovin seřazených v řadě podle rostoucího pH postupně přidávejte výluh z červeného zelí. Pozorujte a zapisujte barevné změny. Takto získanou barevnou škálu vyfoťte společně s aktuální KSICHTí brožurkou a obrázek nám pošlete⁷.
- Dále je třeba připravit si vlastní pH papírky. Filtrační papír, který jste obdrželi v obálce, rozstříhejte na úzké proužky, ponořte je do výluhu červeného zelí a nechte uschnout.
- Nyní si vyberte nějakou zajímavou látku a změřte její pH. Buďte kreativní!

Mezi nejznámější ústojné roztoky patří citrátové pufrы. Dokáží tlumit pH poměrně efektivně v kyselé oblasti (pH 2–7). Jejich příprava je navíc jednoduchá; dají se připravit z běžně dostupných kuchyňských chemikálií.

5. Do tří nádob navažte jedlou sodu a kyselinu citronovou (viz tabulka 1). Směsi rozpustěte v dostatečném množství vody. K takto získaným roztokům přilijte trochu výluhu z červeného zelí. Pozorujte barevné odlišnosti jednotlivých roztoků. Na základě rozdílné barevnosti a barevné škály připravené v předchozí úloze odhadněte přibližné pH všech vzorků.

⁷ Obrázek o maximální velikosti 1 MB pojmenujte příjmení_jmeno_zelí a pošlete na e-mail tereza.dobrovolna@ksicht.natur.cuni.cz.

Tabulka 1: Navážky jedlé sody a kyseliny citronové

Číslo nádoby	$m(\text{NaHCO}_3)$ (g)	m (kyselina citronová) (g)
1	20	10
2	20	20
3	10	20

- Napište a vyčíslete rovnici reakce, která probíhá po rozpuštění jedlé sody a kyseliny citronové v nádobě číslo 1.
- Spočítejte pH vámi připravených roztoků (například pomocí Hendersonovy-Hasselbalchovy rovnice). Dejte si pozor, kyselina citronová je trojsytná, je důležité zvolit správné pK_a pro výpočet.

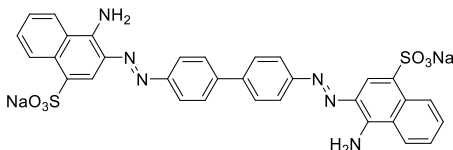
*Nápověda: Hydrogenuhličitan sodný má téměř shodné pK_a jako kyselina citronová do třetího stupně, neutralizační reakce tedy neprobíhá kvantitativně. Při výpočtu pH směsi hydrogenuhličitanu s citronanem trisodným lze tedy tyto molekuly při zachování přijatelné přesnosti výpočtu ztotožnit. **Obzvláště u počítání pH v nádobě č. 1 se vám může stát, že vám bude vycházet záporné číslo v logaritmu. Pokud nevíte, jak dál, uvažujte, že neutralizace do třetího stupně vůbec neprobíhá, a do poměru dávejte látková množství sody a citronanu disodného.***

Úloha č. 4: Kongo Červeně

(13 bodů)

Autor: Ondra Daněk

Kongo červeně byla poprvé syntetizována v roce 1883 Paulem Böttigerem pro Friedrich Bayer Company v Elberfeldu jako barvivo pro textilní průmysl. Mimo jiné barví i amyloid, díky čemuž se využívá v histopatologii.



Tímto jeho využitím se v této úloze ale zajímat nebudeme. Spíše se na kongo červeně podíváme z pohledu organického chemika. V následující úloze projdeme s pár odbočkami syntetickou cestu od běžně dostupných látek až ke kongo červeně.

1. Jakou výhodu má při barvení textilu kongo červeně oproti ostatním barvivům používaným v roce 1883?

Navzdory svému názvu není kongo červeně vždy červená.

2. Jaké jiné barvy může kongo červeně mít? Za jakých podmínek?

Nyní už se podíváme na to, jak by toto krásné barvivo připravoval organický chemik. První fragment nutný pro přípravu kongo červeně je benzidin (bifenyl-4,4'-diamin). Ten lze připravit z nitrobenzenu ve dvou krocích. V prvním kroku nitrobenzen zredukujeme na látku A, která pak v kyselém prostředí podléhá sigmatropnímu přesmyku na benzidin.

3. Jakou souvislost má podtržené slovo v textu s touto úlohou?

4. Popište reakční podmínky redukce nitrobenzenu na látku A a nakreslete strukturu látky A.

5. Nakreslete vzorce všech izomerů, které při přesmyku mohou vzniknout (včetně benzidinu). Při určování izomerů vám může pomoci mechanismus přesmyku, ale do řešení jej není nutné uvádět (nebude součástí hodnocení).

6. Jakou metodou dostupnou před rokem 1952 byste mohli ověřit, že jste získali čistý bifenyl-4,4'-diamin a ne jeho izomery? Jaký jev je zodpovědný za velký rozdíl ve vlastnosti těchto látek, kterou touto metodou měříme?

Připravený benzidin je symetrický derivát bifenyly. (na obou jádrech jsou stejné substituenty ve stejných polohách). Takovému sloučeniny se v průmyslu běžně vyrábějí Ullmannovou reakcí. Asymetrické deriváty bifenyly však tímto způsobem připravit nelze. Za vyvinutí reakce, která jejich syntézu umožňuje, byla v roce 2010 udělena Nobelova cena za chemii.

7. a) Popište princip Ullmannovy reakce, a vysvětlete, proč by jí nešlo využít pro přípravu asymetrických derivátů bifenyly.
- b) Napište název aspoň jedné reakce, kterými se takového látky dají připravit, a uveďte i katalyzátor a substráty, které se v dané reakci používají.

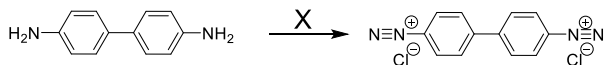
Druhým fragmentem kongo červeně, který budeme potřebovat, je sodná sůl 4-aminonaftalen-1-sulfonové kyseliny. Tu lze připravit pětikrokovou syntézou z naftalenu. Menší nápovědou by vám mohlo být, že činidlo potřebné pro třetí krok syntézy se využívá například i při výrobě heroínu z morfinu.

Skupinu zavedenou ve třetím kroku je potřeba v pátém kroku zase odstranit bazickou hydrolyzou.

8. Napište reakční schéma syntézy sodné soli 4-aminonaftalen-1-sulfonové kyseliny z naftalenu. U každé reakce nad šipkou rozepište reakční podmínky, a kde je to zapotřebí, uveďte i způsob zpracování po reakci (například protřepání koncentrovaným roztokem NaCl apod.)
9. Proč nelze z této syntézy vypustit třetí a pátý krok?
10. Jak se obecně nazývají skupiny, které zavádíme pouze dočasně k ovlivnění reaktivity látky? Napište aspoň jednu další takovou skupinu a:

- její zkratku
- funkční skupiny, na něž je možné ji použít
- jakou látkou, a za jakých reakčních podmínek se tato skupina zavádí
- jak se dá tato skupina odstranit

Teď, když už máme oba potřebné fragmenty kongo červeně, zbývá je už jen vhodným způsobem spojit dohromady. Nejdříve je potřeba benzidin trochu poupravit...



Obrázek 1. Reakce benzidinu

11. Napište název reakce 1 a navrhnete reakční podmínky **X**(činidla, teplotu).

12. Při této reakci vzniká v roztoku světle modrá látka, která hned dále reaguje. Jaká látka to je?

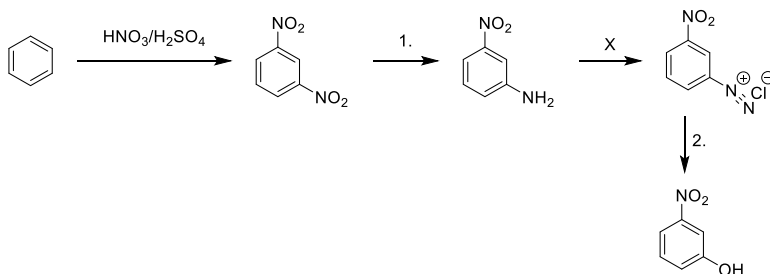
Nakonec už jen musíme nechat zreagovat 2 ekvivalenty sodné soli 4-aminonaftalen-1-sulfonové kyseliny s jedním ekvivalentem vzniklé diazoniové soli, abychom získali požadovanou kongo červeně.

Potom už můžeme vesele barvit, co se nám zlíbí. Ať už to bude nové tričko, nebo amyloid mrtvol, kterou zrovna pitváme.

13. Napište název reakce, která mezi zmíněnými látkami probíhá, a zdůvodněte, proč bude při výše popsané reakci vznikat primárně kongo červeně, a ne některý z jejích polohových izomerů.

Diazoniové soli jsou v organické syntéze velice užitečné. Umožňují totiž zavést velké množství skupin a připravit tak i látky, které na první pohled zdánlivě odporují pravidlům elektrofilní aromatické substituce.

Příkladem takové látky je například *m*-nitrofenol, jež lze připravit z benzenu přes *m*-nitroanilin. Tato syntéza je znázorněná v následujícím schématu. Reakční podmínky **X** jsou stejné jako v otázce 11.



14. Napište činidla, použitá v reakcích 1. a 2. a slovy popište reakční podmínky reakce 2.

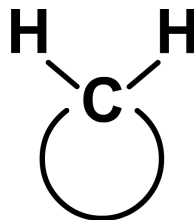
15. Uveďte názvy alespoň dvou dalších reakcí diazoniových solí, za jakých podmínek probíhají a jakou skupinu jimi lze zavést.

Úloha č. 5: Oktarinová

(14 bodů)

Autor: Adam Práda

Ve vědě se takto převratné objevy nedějí často, ale vám se podařilo vlastnoručně izolovat prvek s doslova magickými vlastnostmi. Navíc jste z něj připravili i několik sloučenin, které jsou o to kouzelnější.



V dnešním světě je velmi důležité dokázat precizně připravit dokument na počítači. Takovým dokumentem může být seminární, bakalářská či diplomová práce, disertace či habilitace, řešení KSICHTu nebo vědecký článek. Řešení této úlohy tak bude přijímáno pouze v elektronické podobě (soubor PDF, formát A4), stejně jako jsou přijímány právě vědecké články a vysokoškolské práce. K tomu vám může pomoci následující dokument, který byl vytvořen pro řešitele KSICHTu: ksicht.natur.cuni.cz/ereseni.pdf Důrazně doporučuji si jej přečíst.

Vášim úkolem je napsat „vědecký“ článek o objevu nového kouzelného prvku. Váš článek bude mít následující části: nadpis, seznam autorů a jejich institucí (afiliací), abstrakt, úvod, metody a výsledky, závěr a citace/reference. Pokud si však chcete vyzkoušet, jak se píší články ve skutečnosti, můžete zvolit pořadí, které přirozeně odvíjí článek od vašich výzkumných výsledků:

- | | |
|-----------------------|---------------------|
| (i) Metody a výsledky | (v) Abstrakt |
| (ii) Diskuse, závěr | (vi) Nadpis |
| (iii) Úvod | (vii) Seznam autorů |
| (iv) Reference | |

Celková délka vašeho dokumentu by neměla přesáhnout 3 strany velikosti A4. Články budou přijímány v českém, slovenském a anglickém jazyce. Pro inspiraci můžete nahlédnout do některého vědeckých časopisů s otevřeným přístupem, např. doi.org/10.1039/C9SC02412C.[†]

Na následujících stranách máte k dispozici podrobnější popis toho, co je po vás vyžadováno a jak jsou jednotlivé části bodově ohodnoceny.

[†] Pokud se chcete dozvědět více o psaní vědeckých článků, můžete si prostudovat následující článek doi.org/10.1002/adma.200400767 nebo doporučení vydavatelství Elsevier www.elsevier.com/connect/11-steps-to-structuring-a-science-paper-editors-will-take-seriously.

Isolace a charakterizace magicia a jeho sloučenin

1. *Nadpis:* 0,2 bodu
Stručný a výstižný nadpis. Hlavním účelem nadpisu je předat čtenáři informaci, zda článek obsahuje něco, co by ho mohlo zajímat. Může být kreativní či vtípný, ale měl by odpovídat typu publikace, kde se článek objeví.

Adam Přáda¹, Karel Berka², Lord Voldemort³

¹Department of Chemistry, University of Cambridge, United Kingdom

²Department of Physical Chemistry, Palacky University, Olomouc,
Czech Republic

³Hogwarts School of Witchcraft and Wizardry, United Kingdom

2. *Seznam autorů a jejich institucí:* 0,3 bodu
Každý článek musí mít autora a obvykle jich je více. Jejich pořadí většinou odpovídá jejich příspěvku: [hlavní autor/autoři], [vedlejší autoři], [vedoucí výzkumné skupiny].

Abstrakt

Velké mystérium prvků předložených profesorem Mendeleevem nevydalo veškeré své zlopravěcnství. Z temné magie jsme byli schopni vyizolovat nový prvek, který je mudlům naprosto neznámý. V tomto článku popisujeme jeho objev i jeho vlastnosti.

3. *Abstrakt:* 0,5 bodu
Jeden odstavec shrnující váš článek. Musí být samostatný, nesmí tedy odkazovat na literaturu ani na nic konkrétního uvnitř článku (obrázek, tabulku, rovnici). Pokud čtenáře zaujme nadpis, tak první, co si přečte bude abstrakt, ten ho tedy musí navnadit k přečtení zbytku článku.

1 Úvod

Dnes dobře dostupná tzv. periodická tabulka prvků sestavená prof. Mendělejevem¹ ukazuje pouze prvky vnímané mudly a jejich patetickými přístroji.² Ale osobnosti schopny vnímat magii mohou prvků znamenat mnohem více — známý jsou například oktarína (T. Pratchett, Barva kouzel v překladu Jana Kantorka) nebo tzv. „život“ (Gandalf, Návrat krále, rozhovor s Pipinem v Minas Tirith). V tomto textu popisujeme objev a vlastnosti nového magického prvku magicia a navrhuje pro něj značku Mi, neboť lépe odpovídající Mg již bohužel zabrali mudlové pro hořík.

4. Úvod, citace a seznam zdrojů: 2 body

V úvodní části článku je třeba zasadit článek do kontextu předcházejícího výzkumu a vysvětlit teorii potřebnou k pochopení metod a výsledků. K tomu bude potřeba citovat díla ostatních autorů. Jsou v zásadě tři hlavní způsoby, jak citovat:

- *Číselná citace*

Pokud chceme informovat čtenáře, že věta či odstavec nepochází z naší hlavy, tak použijeme horní index.

Smrtonoš je přízrak obrovitého psa, co straší na hřbitovech. Je předzvěstí smrti.³

Pokud chceme dílo konkrétně zmínit, použijeme číslo v závorkách.

Elfský chléb lembas byl připraven podle metody, jejíž detailní postup je popsán ve studii [4].

Všechny zdroje jsou očíslované v pořadí, ve kterém se objevují, a jejich seznam je na konci článku/práce.

- *Plná citace*

*Pokud chceme odkázat na něčí dílo v abstraktu či popisku obrázku/tabulky, je vhodné použít citaci celou, protože tyto texty by měly být samostatné. (G. Gandalf a W. Saruman, *Journal of Middle-earth*, 2012, **3567**, 5568–9999)*

- *Citace autor-rok*

V některých oborech se cituje stylem autor-rok a citace jsou pak v seznamu uvedeny abecedně dle prvního autora.

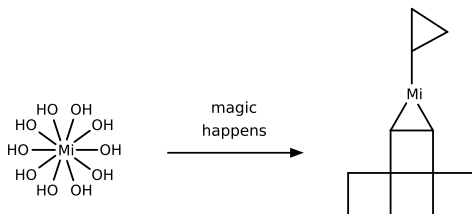
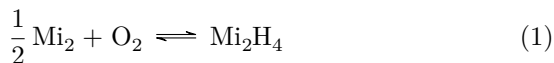
Ministerstvo kouzel vede záznamy o všech zvěromáziích, t.j. kouzelnících a čarodějkách, kteří jsou schopni se přeměňovat na zvířata. (Potter 2007)

Můžete si vybrat, zda budete citovat číselně nebo autor-rok, ale v každém případě vám pomůže program na organizaci referencí. (Mendeley, Zotero, EndNote, atd.).

2 Metody a výsledky

Magiciium je izolovatelné například z krve vlkodlaka pomocí magického postupu z dekaolu za vzniku magického hradu — viz Obrázek 1. Jeho tepelnou dekompozicí pomocí pálení čarodějnických hůlek je možné izolovat dimagiciium, které na vzduchu magickým výbojem prochází transmugrací na hydrid magicinaty (viz rovnici 1). Ten se dá dále destilací se stříbrnými žíněmi jednorožců rozložit na čisté magiciium. Kouz-

livost magie je posléze výrazně ovlivnitelná teplotou (viz rovnici 2).



Obrázek 1: S magicium dekaolem se něco stalo a něco z toho vzniklo. (Taktó vypadá špatný popisěk, budte popisíní.)

$$\Delta \Xi_{\text{Mi}}(T) = \arctan \left[e^{i\tau_{\text{abrakadabra}}} \log \left(\frac{Tk_{\text{hokus}}}{E_{\text{pokus}}} \right) \right] \quad (2)$$

5. Metody a výsledky:

Pomíneme-li humanitní vědy a matematiku, jsou hlavní částí všech článků obrázky (grafy, schémata, nákresy, apod.) a tabulky. Ve této sekci vašeho článku by tedy kromě samotného textu popisujícího metody a výsledky nemělo chybět následující:

- Graf závislosti jedné veličiny na druhé pro několik vzorků s popsanými osami (včetně jednotek) a legendou vytvořený na počítači. 2,5 bodu
- Tabulka hodnot „naměřených“ či „vypočtených“ veličin včetně jejich jednotek. 1 bod
- Ručně nakreslené a naskenované schéma aparatury, která byla použita k izolaci prvku či jinému experimentu zmíněnému v článku. † 2 body
- Matematická rovnice obsahující proměnné, zlomky, exponenty a goniometrické funkce nebo logaritmy. 1 bod
- Chemická rovnice se sumárními vzorci. 1 bod
- Reakční schéma se strukturními vzorci vytvořenými na počítači (viz Obr. 1). 1 bod

†Občas, obzvlášť při řešení KSICHTu, je jednodušší schéma nakreslit ručně a naskenovat, než jej vytvářet na počítači. Proto je důležité se tuto proceduru naučit. V dokumentu zmiňovaném v úvodu najdete i zásady správného skenování, kterých byste se měli držet.

Nezapomeňte na následující pravidla při psaní této sekce:

- Každý obrázek i tabulka musí mít detailní popisek, který vysvětluje jejich obsah, a musí být zmíněny v textu. V ideálním případě by čtenář, který se podívá pouze na obrázky a tabulky a přečte si jejich popisky, měl pochopit hlavní poselství dané práce.
- Obrázky, tabulky a rovnice se číslují zvlášť.
- Všechny obrázky, tabulky a reference musí být zmíněny v textu.
... kouzlivost magie klesá s teplotou, jak je ukázáno v grafu na Obrázku 3.
- Matematické rovnice musí být správně naformátovány. Pravidla dle IUPAC/IUPAP naleznete např. zde: <https://www.aldebaran.cz/onlineskola/etapy/typografie/eclipse/Pravidla.pdf>
- Matematické rovnice jsou součástí vět, mohou se tedy za nimi nacházet interpunkční znaménka.

3 Závěr

V tomto manuskriptu jsme popsali základní objev nového magického prvku magie (Mi) a jeho prvotní vlastnosti. Předpokládáme, že další výzkum by se měl zaměřit na jeho další magické vlastnosti a možnosti aplikací v obraně kouzelníků před světem mudlů.

7. Závěr: 0,5 bodu
Zde interpretujete výsledky prezentované v předchozí sekci, popisujete jejich význam pro vaše pole bádání a navrhuje, jakým směrem by se měl ubírat další výzkum.

+ Samotný obsah článku: 2 body
Samozřejmě bude ohodnocena i kreativita při psaní článku. Nejlepší výtvořby budou publikovány.

Seznam použitých zdrojů

- (1) D. I. Mendelejev, *Zeitschrift für Chemie*, 1869, **12**, 405–406.
- (2) Names and symbols of the elements with atomic numbers 113, 115, 117 and 118, *Pure Appl. Chem.*, 2016, **88**, 1225–1229.
- (3) H. Potter a A. Dumbledore, *Journal of Magical Chemistry*, 2007, **58**, 101–114.
- (4) G. Gandalf a W. Saruman, *Journal of Middle-earth*, 2012, **3567**, 5568–9999.

Seriál: Velká chemická datová revoluce

1. díl: Historie chemických dat – od ústního podání k Wikidatům

Autoři: Martin Balouch, Karel Berka, Adam Tywoniak



Drazí KSICHTI řešitelé a řešitelky, když jste si v anketě vybrali Velkou chemickou datovou revoluci, zjistíte, že jste netušili, jak moc velkou radost nám tím uděláte. Donutili jste nás totiž připravit Vám průvodce doposud velice málo známou, ale o to zajímavější odnoží chemie – chemoinformatikou, tedy odvětvím zabývajícím se ukládáním a zpracováním chemických dat. A protože chemici za poslední století dokázali nasyntetizovat a popsat přibližně 750 milionů molekul,⁸ je těch dat docela dost.

Seriál bude mít již tradičně čtyři části, ve kterých se zaměříme nejprve na historii chemických informací, poté si povíme něco o současných databázích a jak s nimi pracovat a využívat je, a nakonec snad nahlédneme i do (blízké) budoucnosti a budeme se snažit předpovědět, jak bude vypadat chemie v době, kdy vy, nynější studenti středních škol, budete dokončovat svá vysokoškolská studia či pracovat v některém chemickém podniku.

Dnešní stav dostupnosti chemických informací, kdy stačí kliknout myší a můžeme prohlížet údaje o molekulách a reakcích nashromážděné za několik století v celém světě, je výsledkem dlouhodobého vývoje a nebyl by možný bez pokroku v pochopení chemie samotné, využití rozvoje informatiky a prudkého nárůstu možností počítačového zpracování, ukládání a přenosu dat. Ani se nechce věřit, jak pomalu to všechno začalo...

Doba ústního podání

Z počátku probíhalo veškeré sdílení informací ústní cestou, a bylo proto pomalé a neefektivní: například technologii metalurgie mědi, která byla vynalezena v Malé Asii kolem roku 3800 př. n. l., trvalo přibližně 1000 let, než dorazila na naše území. Ovšem už v době, kdy začal pozvolný ústně předávaný přesun znalosti výroby mědi z Blízkého východu na sever, se v Mezopotámii začaly formovat první města a státy. To přineslo nové informace, které bylo třeba sbírat a vyhodnocovat pro zajištění chodu velkého společenství (kdo vlastní který dům, jaká byla úroda, kolik má kdo odvádět daní či obětí z úrody, kolik mužů a koní má být odvedeno do armády). Takové množství informací samozřejmě nikdo nemohl udržet v hlavě, a tak byl vynalezen způsob zapisování potřebných informací na hliněné tabulky a první písmo.

⁸ zdroj: molekuly, jež je možno zakoupit z katalogů na <https://zinc.docking.org/>

Doba hliněných destiček

Ačkoliv drtivá většina nalezených popsaných tabulek obsahuje úřední záznamy o svatbách, úrodě, dlužích či obřadech, existují i záznamy, které můžeme považovat za počátky vědy. Mezopotámští vědci popsali a zapsali pohyby hvězd, planet či Měsíce. S rostoucím množstvím záznamů začaly vznikat první knihovny. Jedna ze zchovalých destiček nám přinesla zprávu o prvních chemících, tedy přesněji chemičkách Tapputi a ()ninu,⁹ které jsou zmíněny na babylonských hliněných destičkách, datovaných 1200 př. n. l., jako výrobkyně parfémů (viz obrázek vpravo převzatý z Wikipedie). Používaly květiny, olej, puškovec, cypřiš, myrrhu a balzámové dřevo. To vše rozpouštěly ve vodě a několikrát destilovaly a filtrovaly, dokud nebyly spokojené s výsledkem.¹⁰ Jejich další hliněné destičky o výrobě parfémů, o nichž se v záznamu píše, se bohužel nedochovaly.



Doba svitků

Antické Řecko a jeho civilizace přinesla výrazné zrychlení zapisování pomocí kresby na papyrus či pergamen. Významným místem sběru a uchování písemných záznamů se stala Alexandrijská knihovna na území dnešního Egypta, která obsahovala stovky tisíc svitků papyru a pergamenu tehdy tříděných podle činnosti autora. Papyrus i pergamen se ale bohužel časem rozpadají, takže záznamy bylo třeba relativně často obnovovat. Množství písařů pověřených pořizováním opisů tak plnilo funkci, kterou dnes zastávají kopírovací stroje a disková pole. Knihovna měla dokonce i prvního profesionálního knihovníka. V průběhu římských dob¹¹ a s nástupem křesťanství pak knihovna postupně ztrácí na významu a nakonec zaniká.¹² S pádem starověkého světa se Evropa dostává do kulturního úpadku a nedá se příliš mluvit o vzniku či zapisování vědy. Prakticky veškerá vzdělanost je soustředěna v církevních společnostech – ať už v židovských synodách nebo v křesťanských kláštřích – a publikování je omezeno na ruční přepisování náboženských textů (především Bible) a psaní kronik.

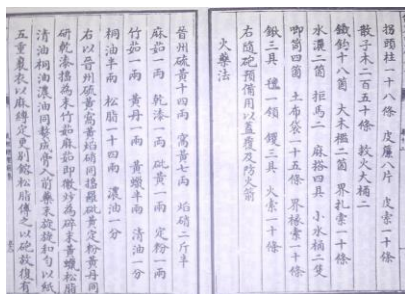
⁹ první část jména je nečitelná

¹⁰ Houlihan S., Wotiz J.H.: Women in chemistry before 1900. *J. Chem. Educ.* 1975, 52, 6, 362, <https://doi.org/10.1021/ed052p362>

¹¹ zvláště jí dalo zabrat obléhání Alexandrie Caesarem v roce 45 př. n. l., kdy částečně vyhořela

¹² <https://duha.mzk.cz/clanky/vznik-staroveke-alexandrijske-knihovny>

Doba knih



Obrázek 1. Nejstarší známý zápis složení střelného prachu z Wujing Zongyao (1044 n. l.), Wikipedie.

křesťanské vzdělance v dnešní Sýrii a postupem času vznikla rozsáhlá sbírka, se kterou přes Cordobský chalífát postupně přichází do kontaktu křesťanská část Evropy.¹³ Takto byly ve 12. a 13. století znovuobjeveny Aristotelovy myšlenky a přidaly se i arabské a perské poznatky z matematiky, včetně algebry (الجبر, *al-džabr*).

Také rozsáhlé čínské znalosti chemie zůstávaly uzavřeny v Říši středu, která si je přísně hlídala. Ale před průmyslovou špionáží byzantských mnichů své know-how výroby hedvábí roku 552 n. l. neuchránila.¹⁴ Podobně vedlejší produkt výzkumného programu elixíru života – „ohnivá medicína“ (*huǒ yào*, 火药/火藥, dnes spíše známá pod názvem „střelný prach“) – poprvé popsány roku 808 n. l. v textu *Taishang Shengzu Jindan Mijue* (太上聖祖金丹秘訣) byl již v roce 904 n. l. použit k bojovým účelům.¹⁵ Na tomto případě je vidět, jak je důležitá znovupoužitelnost chemických látek, jak se dnes ukazuje na tzv. „drug repurposing“, kdy se studují možnosti použití léků mimo obvyklé indikace...¹⁶

Prudký rozvoj přírodních věd a s ním související nárůst množství získávaných informací nastal v 15. století v souvislosti s filozofickou revolucí v renesanci.

¹³ <https://plato.stanford.edu/entries/arabic-islamic-greek/>

¹⁴ https://en.wikipedia.org/wiki/Smuggling_of_silkworm_eggs_into_the_Byzantine_Empire

¹⁵ <https://en.wikipedia.org/wiki/Gunpowder>

¹⁶ byť uznáváme, že takováto změna z léčiva na látku život ukončující není většinou žádána: opačným příkladem je využití nitroglycerinu v léčbě srdce.

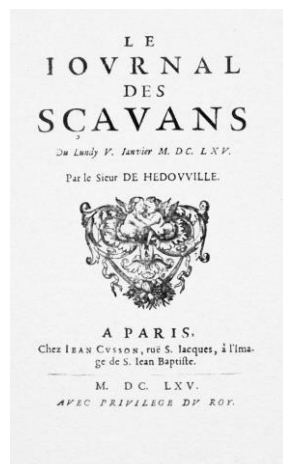
Přední osobnosti věd a umění (jmenujme za všechny Leonarda da Vinci) bádají v mnoha oblastech zároveň. Zásadní zrychlení a zlevnění distribuce vědomostí pak přináší vynález knihtisku, zejména díky úspoře času a nákladů oproti pracnému a drahému opisu manuskriptů. Skokově se tak mění poměr mezi rozpadajícími se spisy a možností opatřit jejich kopie tiskem novým. Publikujících autorů je stále poměrně málo a významné knihy jsou vydávány opakovaně a v několika překladech: za všechny uveďme *De la pyrotechnia* z roku 1540, první systematické pojednání o metalurgii s mnoha dřevoryty.¹⁷

Doba časopisů

Dalším významnou etapou vývoje vědeckého publikování je období vzniku prvních vědeckých společností. V Anglii se v 17. století začínají konat pravidelná setkání skupiny vědců soustředěné kolem Roberta Boyla, při kterých členové představují výsledky své vědecké činnosti. Z tajného společenství vzniká v roce 1660 za posvěcení anglického krále *The President, Council and Fellows of the Royal Society of London for Improving Natural Knowledge*, zkráceně známá jako *The Royal Society of London*.¹⁸

V roce 1666 vzniká na dvoře Ludvíka XIV. francouzská Akademie věd – *Académie des sciences*, která pořádá pravidelné schůze v královské knihovně v Paříži a později přesídluje do dnešního Louvru.¹⁹ V těchto společnostech vznikla nová forma vědecké publikace, která je dodnes velmi oblíbená – vědecký článek v rámci časopisu. Myšlenka byla jednoduchá: jeden článek na jeden objev nebo pozorování. Tak vznikly v roce 1665 první vědecké časopisy: nejprve *Journal des sçavans* (viz obrázek z wikipedie) vydávaný jednou ročně²⁰ a o dva měsíce později *Philosophical Transactions of the Royal Society*.²¹

Teprve půl století po Anglii a Francii se do vědecké činnosti moderního typu zapojuje Amerika: v roce 1743, tedy ještě před Deklarací nezávislosti, zakládá



¹⁷ Biringucci B.: *Pyrotechnia*. Dover Classics of Science and Mathematics Courier Corp., 1990, ISBN 0486261344 <https://books.google.de/books?id=ruBbKRKGeOwC>

¹⁸ <https://royalsociety.org/about-us/history/>

¹⁹ <https://www.academie-sciences.fr/en/Histoire-de-l-Academie-des-sciences/history-of-the-french-academie-des-sciences.html>

²⁰ <https://gallica.bnf.fr/ark:/12148/cb343488023/date>

²¹ <https://royalsociety.org/~media/publishing350/publishing350-exhibition-catalogue.pdf>

Benjamin Franklin *American Philosophical Society*.²² Dnes vznikají nové vědecké časopisy v podstatě denně.²³

Vědecké a učené společnosti tohoto typu si zachovaly svůj význam až do 19. století, často v podobě místních a regionálních sdružení pořádajících zvané přednášky a demonstrace experimentů. Jmenujme za všechny ještě *Cambridge Philosophical Society*, která významně přispěla k excelenci univerzity v přírodních vědách. Na setkáních se četly korespondenční příspěvky (mj. z přírodopisných cest Charlese Darwina) a výměna časopisů a sborníků s dalšími společnostmi umožnila rychlé předávání informací s dalšími vědeckými centry.²⁴

Doba konferencí

Pro chemii stejně jako pro ostatní vědy pak ve srovnání s předchozím obdobím narůstá množství dostupných znalostí. Tento nárůst ale současně doprovázel chaos v pojmech, konceptech a označeních, což vytvářelo velmi nepřehlednou situaci. Na obrázku je 19 různých zápisů kyseliny octové uvedených v Kekulého učebnici z roku 1861.²⁵ A navíc na rozdíl od dnešního globálního jazyka vědy – angličtiny – se o vědě psalo v národních jazycích, a to především anglicky, francouzsky a německy.

Za této situace byla 3. a 4. září 1860 v Karlsruhe uspořádána první mezinárodní vědecká konference k vyřešení aspoň některých rozporů.²⁶ Konferenci svolalo trio chemiků August Kekulé z Ghentu, Charles-Adolphe Wurtz z Paříže a Karl Weltzien z Karlsruhe a

$C_2H_4O_2$	empirische Formel.
$C_2H_4O_2 + HO$	dualistische Formel.
$C_2H_4O_2 \cdot H$	Wasserstoffsäure-Theorie.
$C_2H_4 + O_2$	Kertheorie.
$C_2H_4O_2 + HO_2$	Longchamp's Ansicht.
$C_2H + H_2O_2$	Graham's Ansicht.
$C_2H_4O_2 + HO$	Radicaltheorie
$C_2H_4 \cdot O_2 + HO$	Radicaltheorie.
$C_2H_4O_2$	Gerhardi. Typentheorie.
$C_2H_4O_2$	Typentheorie(Schischkoff)etc.
$C_2O_2 + C_2H_2 + HO$	Berzelius' Paarlingtheorie.
$H O \cdot (C_2H_2)C_2 \cdot O_2$	Kolbe's Ansicht.
$H O \cdot (C_2H_2)C_2 \cdot O \cdot O_2$	ditto
$C_2(C_2H_2)O_2$	Wurtz.
$C_2H_2(C_2O_2)$	Mendius.
$C_2H_2 \cdot HO$	Geuther.
$C_2 \left(\begin{array}{c} C_2H_2 \\ O \end{array} \right) O + HO$	Rochleder.
$\left(C_2 \begin{array}{c} H_2 \\ CO \end{array} + CO_2 \right) + HO$	Persoz.
$C_2 \left\{ \begin{array}{c} C_2H_2 \\ H \\ H \end{array} \right\} O_2$	Buff.

²² <https://www.amphilsoc.org/about>

²³ <http://blog.cdsciencepub.com/21st-century-science-overload/>

²⁴ Ferry G.: The society that turned Cambridge into a scientific powerhouse. *Nature* 2019, 566, 324-325, <https://doi.org/10.1038/d41586-019-00608-w>

²⁵ Kekulé, von Stradonitz, A. *Lehrbuch der organischen Chemie, oder der Chemie der Kohlenstoffverbindungen*; F. Enke: Erlangen, 1861. <https://archive.org/details/lehrbuchderorga061acogooq/page/n6>

²⁶ Everts S.: When Science Went International. *Chemical & Engineering News* 2010, 9, <http://pubsapp.acs.org/cen/science/88/8836sci1.html>

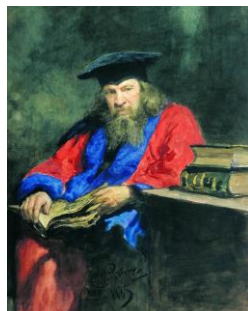
The First International Gathering of Chemists. *Chemistry International -- Newsmagazine for IUPAC* (2010), 32(6), pp. 10-15. doi:[10.1515/ci.2010.32.6.10](https://doi.org/10.1515/ci.2010.32.6.10)

snažili se dosáhnout shody v základních definicích, například molekulové hmotnosti, či rozhodnout o platnosti Avogadrovy hypotézy. Řešila se i otázka dvouatomových molekul, proti níž stál slavný švédský chemik Jöns Jacob Berzelius, který vysvětloval struktury solí i molekul na základě interakcí mezi atomy s rozdílnou elektronegativitou. Podle tohoto dualismu by se atomy téhož prvku elektrostaticky odpuzovaly, a vznik molekuly H_2 nebo O_2 by tak nebyl možný. Jak dnes už víme, mýlil se.²⁷

Na výsledcích konference bylo ale vidět, že standardizace je pro další rozvoj chemie klíčová, a standardy se tedy postupně začaly ustanovovat. V roce 1919 vznikla známá Mezinárodní unie pro čistou i aplikovanou chemii, známá spíše pod zkratkou IUPAC, která se již 100 let snaží o mezinárodní standardizaci v chemii.²⁸

Doba tabulky

Na konferenci v Karlsruhe byli přítomni také dva chemici, které nezávisle na sobě napadlo uspořádat známé chemické prvky – Dmitrij Ivanovič Mendělejev (na obrázku vpravo, zdroj: Wikipedie) a Lothar Meyer. Inspiroval je příspěvek, který na obhajobu Avogadrovy hypotézy přednesl Stanislao Cannizzaro.²⁹ V roce 1869 přišel Mendělejev se svou periodickou tabulkou, která je dnes notoricky známá, ale v jeho podání byla poněkud děrovaná.³⁰ Například jí zcela chyběly vzácné plyny objevené až kolem roku 1890 Williamem Ramsayem, který se nejdřív domníval, že Mendělejevovu periodickou tabulku objevem vzácných plynů vyvrátil, ale posléze ji vlastně dokonale doplnil. Mendělejev také správně předpověděl vlastnosti chybějících prvků jako například gallia, které ve své tabulce označil za eka-aluminium, tedy „za hliníkem“. Můžete se sami podívat, jak přesně se Mendělejev „trefil“ do vlastností gallia objeveného Paul-Émilem Lecoqem v roce 1875 (viz tabulka).



²⁷ Pripomeňme citát Maxe Plancka o vědě, který se v angličtině stručně uvádí jako “Science Advances One Funeral at a Time”. https://en.wikipedia.org/wiki/Planck%27s_principle

²⁸ <https://iupac.org/who-we-are/our-history/>

²⁹ <https://www.sciencehistory.org/historical-profile/stanislao-cannizzaro>

³⁰ <http://www.rsc.org/periodic-table/history/about>

Tabulka 1. Srovnání vlastností predikovaného Eka-aluminia a změřeného gallia

	Eka-aluminium (Ea)	Gallium (Ga)
Molární hmotnost	~ 68	69,72
Hustota	6,0 g/cm ³	5,9 g/cm ³
Teplota bodu tání	nízká	29,78 °C
Valence	3	3
Metoda objevu	pravděpodobně ze spektra	spektroskopicky
Oxid	vzorec Ea ₂ O ₃ , hustota 5,5 g/cm ³ , rozpustný v kyselinách i zásadách	vzorec Ga ₂ O ₃ , hustota 5,88 g/cm ³ , rozpustný v kyselinách i zásadách

Mendělejev tak ukázal, že úspěšný chemický model musí být nejen popisný, ale musí také umožňovat testovatelné předpovědi.

Doba katalogů

Jak už jsme psali výše, situace v 19. století byla poměrně nepřehledná, zároveň vycházelo stále větší množství časopisů a publikací. Již v době před zásadním kongresem a první podobou periodické tabulky vydává v Paříži Pierre-Joseph Macquer, lékař a autor několika učebnic chemie, první *Dictionnaire de Chymie* (1776).³¹ Publikaci, která měla shrnovat veškerou chemickou znalost té doby, se ale nedařilo držet aktuální. Odlišný přístup zvolil již zmíněný Berzelius a začal roku 1822 s roční periodicitou vydávat *Arsberättelse om Frangstegen i Physik och Chemie* (Výroční zprávy o pokrocích ve fyzice a chemii) ve švédštině, francouzštině a němčině, kde používal vlastní způsob zápisu vzorců.

Skutečně použitelnou a rozšířenou soubornou publikací té doby se stala *Handbuch der theoretischen Chemie* (Příručka teoretické chemie), poprvé vydaná mezi lety 1817 a 1819, jejímž autorem byl Leopold Gmelin, předchůdce Roberta Bunsena v Heidelbergu.³² Ze začátku obsahovala dva svazky věnované anorganické chemii a třetí pro chemii organickou, který s postupem času stále rychleji nabýval. Cílem bylo udržet přehled o všech známých prvcích a sloučeninách a jejich vlastnostech. Za svůj úspěch příručka vděčí zachování objektivitu při tehdejších četných odborných sporech (zápisy z kongresu v Karlsruhe zmiňují poměrně napjatou atmosféru) a systematickému třídění obsahu doplněného o citace primárních zdrojů. Podobně jako Carl von Linné pro

³¹ https://archive.org/details/dictionnairedech01macq_0/

³² <https://www.chemistryworld.com/features/200-years-of-gmelins-handbook/3007265.article>

taxonomii organismů vytvořil Gmelin pečlivě uspořádanou kartotéku a důsledně slučoval duplicitní záznamy. Pro anorganické sloučeniny vytvořil systém třídění na základě složení z prvků, kterým přiřadil prioritní číslo, odlišné od pořadí v periodickém systému (viz obrázek na následující straně).³³ Každou sloučeninu pak zařadil do oddílu nesoucího číslo nejvyššího obsaženého prvku: chlorid sodný bychom hledali v oddílu 21, síran draselný v oddílu 22. Postupným vývojem se dílo, ve kterém po Gmelinově úmrtí pokračovali členové redakce, přeorientovalo jako *Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry*.



Vzniklý prostor v organické chemii zaplnil roku 1881 Friedrich Konrad Beilstein (na fotografii), když poprvé publikoval svoji *Handbuch der organischen Chemie* (Příručku organické chemie), ve které shromáždil vlastnosti organických sloučenin známé z literatury.³⁴ První edice pokrývala na bezmála 2200 stránkách na 1500 sloučenin. Jednotlivé sloučeniny jsou v katalogu uváděny pod Beilsteinovým registračním číslem: např. aceton má 635 680. Beilsteinův katalog pokrývá vědeckou literaturu od roku 1771 a obsahuje experimentálně validované údaje o milionech chemických reakcí. Dnes je Beilsteinův katalog spolu s digitalizovanou verzí Gmelinovy příručky součástí online placené databáze Reaxys, kterou spravuje vydavatel Elsevier.³⁵

Protože příprava každého vydání Gmelinovy i Beilsteinovy příručky i menších aktualizací zabrala několik let, trvala i během jejich existence poptávka po rychlejších sekundárních zdrojích, které by výzkumníkům ušetřily čas nutný pro prohledávání aktuálních vydání velkého množství různých titulů. Prvním periodikem, které můžeme označit jako *abstract journal* v chemii, byl *Pharmaceutisches Centralblatt* vydávaný od roku 1830 nejprve se zaměřením na farmaceutickou chemii, později jako *Chemisches Zentralblatt*. Cílem periodika bylo poskytnout přehled o publikovaných poznacích v časopisech, knihách a patentech. V roce 1888 jeho redakce pokrývala 273 časopisů a týdně publikovala shrnutí roztříděné podle témat. V souvislosti s nástupem angličtiny jako světového vědeckého jazyka byl *Zentralblatt* postupně vystřídán novějšími *Chemical Abstracts*, vydávanými od roku 1907 v USA. Jejich předchůdcem byl *Review of American Chemical Research* (1895), původně příloha k *Journal of the American Chemical Society*.³⁶

³³ <https://de.wikipedia.org/wiki/Gmelin-System>

³⁴ https://en.wikipedia.org/wiki/Beilstein_database

³⁵ <https://www.reaxys.com/>

³⁶ <https://web.archive.org/web/20100612193647/http://cas.org/aboutcas/cas100/annivhistory.html>

Reihenfolge (Systemnummern) der im Gesamtwerk behandelten Elemente

Gmelin System of Elements and Compounds

	System-Nr.	Symbol	Element		System-Nr.	Symbol	Element
	1		Edelgase		35	Al	Aluminium
	2	H	Wasserstoff		36	Ga	Gallium
	3	O	Sauerstoff		37	In	Indium
	4	N	Stickstoff		38	Tl	Thallium
	5	F	Fluor		39		Seltene Erden
	6	Cl	Chlor		40	Ac	Actinium
	7	Br	Brom		41	Ti	Titan
	8	J	Jod		42	Zr	Zirkonium
	9	At	Astat		43	Hf	Hafnium
	10	S	Schwefel		44	Th	Thorium
	11	Te	Tellur		45	Ge	Germanium
	12	Po	Polonium		46	Sn	Zinn
	13	B	Bor		47	Pb	Blei
	14	C	Kohlenstoff		48	V	Vanadium
	15	Si	Silicium		49	Nb	Niob
	16	P	Phosphor		50	Ta	Tantal
	17	As	Arsen		51	Pa	Protactinium
	18	Sb	Antimon		52	Cr	Chrom
	19	Bi	Wismut		53	Mo	Molybdän
	20	Li	Lithium		54	W	Wolfram
	21	Na	Natrium		55	U	Uran
	22	K	Kalium		56	Mn	Mangan
	23	NH ₄	Ammonium		57	Ni	Nickel
	24	Rb	Rubidium		58	Co	Kobalt
	25	Cs	Caesium		59	Fe	Eisen
	26	Be	Beryllium		60	Cu	Kupfer
	27	Mg	Magnesium		61	Ag	Silber
	28	Ca	Calcium		62	Au	Gold
	29	Sr	Strontium		63	Ru	Ruthenium
	30	Ba	Barium		64	Rh	Rhodium
	31	Ra	Radium		65	Pd	Palladium
	32	Zn	Zink		66	Os	Osmium
	33	Cd	Cadmium		67	Ir	Iridium
	34	Hg	Quecksilber		68	Pt	Platin
					69	Tc	Technetium ¹⁾
					70	Re	Rhenium
					71		Transurane

Dem einzelnen Element werden alle Verbindungen mit denjenigen Elementen zugeordnet, die im Gmelin-System vor diesem Element stehen. Bei dem Element Zink mit der System-Nr. 32 stehen z. B. alle Verbindungen mit den Elementen der System-Nr. 1 bis 31.

The material under each element number contains all information on the element itself as well as on all compounds with other elements which precede this element in the Gmelin System.

For example, zinc (system number 32) as well as all zinc compounds with elements numbered from 1 to 31 are classified under number 32.

¹⁾ Diese System-Nr. ist im Jahre 1941 unter der Bezeichnung „Mausrium“ erschienen.

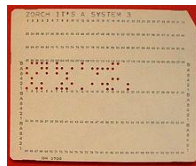
Periodensystem der Elemente mit Gmelin Systemnummern siehe Innenseite des vorderen Deckels

Obrázek 2. Řazení prvků v Gmelinově systému převzat z ref.³⁷

³⁷ Fluck, E., Gmelin, L. (1952) *Gmelins Handbuch Der Anorganischen Chemie Achte Auflage*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH. doi: [10.1007/978-3-662-11174-1](https://doi.org/10.1007/978-3-662-11174-1)

Doba textových databází

Tím se zvolna dostáváme k otázce, kdy se katalogy vlastně přeměnily na databáze. Protože databázi může být v principu každý počítačem čitelný soubor, pak prvními databázemi musely být děrované štítky (viz obrázek), které používaly už první počítače od 40. let 20. století.



Z původních *Chemical Abstracts* se roku 1956 stává indexová služba *Chemical Abstracts Service* (CAS) jako součást Americké chemické společnosti (ACS) a v roce 1965 byl vydán katalog chemických a biologických aktivit (CBAC) jak v tištěné formě, tak na magnetických páskách. V tomtéž roce začala fungovat databáze *CAS Chemical Registry System*, CAS pak roku 1980 uvedl novou službu *CAS ONLINE*, která běží dodnes.³⁸

CAS Chemical Registry System zavádí systém tzv. CAS registračních čísel (CAS Registry Number[®]), což je celosvětově uznávaný jednoznačný číselný kód používaný v chemii pro chemické látky, polymery, biologické sekvence, směsi a slitiny. Díky tomu již jednoznačná identifikace látky či směsi není závislá na názvosloví ani národních jazycích. Registrační číslo je rozděleno spojovníky do tří zón, z nichž první má proměnný počet číslic, další má vždy právě dvě číslice a poslední zóna obsahuje číslici jedinou, která slouží jako kontrolní součet pro umožnění automatické kontroly správnosti zápisu registračního čísla (podobné kontrolní součty se používají u identifikátorů ISBN či bankovních účtů).

Toto kontrolní číslo se vypočte následujícím způsobem: vynechá se kontrolní číslice a pak se postupuje zprava doleva, jednotlivé číslice se násobí přirozenými čísly zvyšovanými po jednotce a jednotlivé součiny se sčítají. Z výsledného součtu se použije pouze zbytek po dělení deseti. Například kofein má registrační číslo 58-08-2, výpočet tedy vypadá následovně:

$$(8 \times 1 + 0 \times 2 + 8 \times 3 + 5 \times 4) = 52, \text{ zbytek po dělení } 10 \text{ je tedy } 2.$$

Nevýhodou CAS a Beilsteinova čísla je ale skutečnost, že samo číslo nenese informaci o tom, jaká chemikálie se v něm skrývá. Tu musíme vždy dohledat v kompletním indexu, ať už ručně či pomocí softwaru. Navíc jsou tato čísla použitelná pouze pro látky publikované a již registrované, ale nikoliv interně v rámci akademického či firemního výzkumu nových látek. Proto se ve firmách začali zajímat o způsob, jak ukládat chemické informace přímo v počítači.

³⁸ Neufeld M.L., Cornog M.: Database History: From Dinosaurs to Compact Discs. *J. Am. Soc. Inf. Sci.* 1986, 37(4), 183, doi:[10.1002/\(SICI\)1097-4571\(198607\)37:4<183::AID-AS12>3.0.CO;2-W](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4571(198607)37:4<183::AID-AS12>3.0.CO;2-W)

Doba chemických databází

Tento problém řešil v 80. letech 20. století také David Weininger v americké vládní environmentální agentuře USEPA Mid-Continent Ecology Division Laboratory v Duluthu. Vymyslel tehdy standard SMILES,³⁹ což je zkratka pro „zjednodušenou molekulární specifikaci pro vstupní řádky“ (angl. “Simplified Molecular Input Line Entry Specification”).⁴⁰ Později byl standard modifikován a rozšířen, především díky Daylight Chemical Information System, Inc., kterou David Weininger založil.⁴¹ V roce 2007 vznikl otevřený standard nazvaný OpenSMILES⁴² a nadále se rozvíjí – zatím poslední přídavek je specifikace velkých úsměvů pro polymery (BigSMILES) z roku 2019.⁴³

SMILES má ještě jednu výhodu – na rozdíl od jiných formátů je totiž čitelný i námi smrtelníky, a nikoli jen počítačem. SMILES popisuje molekulu jako jeden dlouhý řetězec složený z navázaných atomů. Pro zápis atomů v molekulách používáme značky prvků (B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br, I atd.). Implicitní atomy vodíku neuvádíme: dopočítávají se podle vaznosti. U vazeb je to podobné, základní jednoduchá vazba není zobrazena, pro dvojnou, trojnou a čtvernou vazbu se pak používá symbolů =, # a \$. Aromatické atomy se značí malými písmeny. Cykly se rozdělují pomocí čísel a vedlejší řetízky vycházející z hlavního řetězce se na místo připojují pomocí závorek. SMILES také umí zapisovat reakce a stereochemii – pár příkladů najdete v následující tabulce.

ethanol	CCO	pyridin	c1cnccc1
kyselina octová	CC(=O)O	trans-2-buten	C/C=C/C
cyklohexan	C1CCCCC1	L-alanin	N[C@@H](C)C(=O)O
chlorid sodný	[Na+].[Cl-]	Substituce	C=CCBr>>C=CCI

Postupně začalo vznikat neuvěřitelné množství databází, které se navíc svým zaměřením často překrývají. Pokud proto hledáte obecnou chemickou databázi,

³⁹ Weininger D: SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules. *J. Chem. Inf. Model.* 1988, 28 (1): 31–6. doi:[10.1021/ci00057a005](https://doi.org/10.1021/ci00057a005)

⁴⁰ SMILES jste si mohli vyzkoušet v úloze Chemické úsměvy: [ksicht-14-3.a5.pdf](#)

⁴¹ o jeho dalších úspěších si můžete přečíst ve vzpomínkovém článku od jeho bývalých kolegů a soupeřů - Gasteiger J, Martin Y, Nicholls A, Oprea TI, Stouch T: Leaving us with fond memories, smiles, SMILES and, alas, tears: a tribute to David Weininger. *J Comput Aided Mol Des.* 2018, 32(2), 313-319. doi:[10.1007/s10822-018-0104-3](https://doi.org/10.1007/s10822-018-0104-3)

⁴² <http://opensmiles.org/>

⁴³ scitechdaily.com/scientists-to-communicate-polymers-more-easily-with-new-notation-system


máte na výběr minimálně z *PubChem*⁴⁴ (NCBI, USA), *ChemSpider*⁴⁵ (RSC, UK), *ChEMBL*⁴⁶ (EBI, EU), *IDSM*⁴⁷ (ELIXIR-CZ, CZ) a mnoha dalších. A pokud vás zajímají specializované chemické databáze, je jich ještě mnohem více.⁴⁸ Hlavními chemickými databázemi se budeme detailně zabývat v příštím díle.


Postupem času se ale mezi jednotlivými databázemi přece jen začaly vynořovat rozdíly a bylo čím dál tím zřejmější, jak moc se vyplatí, budou-li jednotlivé databáze vzájemně propojené: každá se pak může specializovat a společné informace může získávat z ostatních databází.


Doba FAIR databází

Hlavní problém s dnešními databázemi je totiž v jejich uchování – data narůstají exponenciálně a jejich udržování a kontrola začíná být pomalu, ale jistě mimo reálné možnosti lidských kurátorů. I proto vznikla v EU iniciativa tzv. FAIR dat,⁴⁹ která se snaží tento problém vyřešit pomocí následujících principů, viz obrázek:

Findable 

Accessible 

Interoperable 

Reusable 

- *Dohledatelnost* – data mají globálně unikátní identifikátory a veřejně sdílená metadata,⁵⁰ které je umožňují dohledat.

- *Přístupnost* – (meta)data jsou dostupná pomocí standardního komunikačního protokolu.

- *Součinnost* – metadata jsou propojena s dalšími metadaty, aby bylo možné data kombinovat.

- *Znovupoužitelnost* – data mají jasnou licenci pro další použití a jsou popsána tak, že je lze znovu použít.

Příkladem vysoce propojených dat jsou *Wikidata*.⁵¹ Jde o druhotnou databázi, která se snaží propojovat ostatní databáze mezi sebou i vůči jednotlivým Wiki

⁴⁴ <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

⁴⁵ <http://www.chemspider.com>

⁴⁶ <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>

⁴⁷ <https://idsm.elixir-czech.cz/>

⁴⁸ <https://fairsharing.org/biodbcore/?q=chemistry>

⁴⁹ Wilkinson MD a kol.: The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship. *Sci Data*. 2016; 3: 160018. doi :[10.1038/sdata.2016.18](https://doi.org/10.1038/sdata.2016.18)

⁵⁰ metadata jsou data o datech: například informace o uložení dat, původu obsahu apod.

projektům. Wikidata je databáze čitelná jak pro lidi, tak především pro stroje, protože data jsou strukturovaná. Veškerá (wiki)data jsou popsána pomocí jednotlivých položek, majících štítky, popisy a libovolné množství aliasů. Položky jsou jednoznačně identifikovány písmenem Q následovaným číslem, např. voda (Q283). Tvzení podrobně popisují charakteristiky dané položky a skládají se z vlastností a hodnoty. Vlastnosti ve Wikidatech mají prefix P následovaný číslem, např. má hmotnost (P2067). U chemických látek (Q11173) můžete například přidat vlastnost určující jednotlivé identifikátory (CAS, Beilstein, ale i další), udávat její SMILES, ale zaznamenávat i výlučně chemické vlastnosti jako složení, molekulovou hmotnost, rozpustnost, případně i to, jakým způsobem látka působí v biologii či medicíně (jak se látka podává, případně s jakým receptorem či enzymem v těle interaguje).

Speciální odkazy na články propojují danou položku s odpovídajícím obsahem na klientských wiki, jako jsou Wikipedie nebo Wikiknihy.⁵² Všechny tyto informace lze zobrazit v jakémkoliv jazyce, i když byly zadány v jazyce jiném. A navíc, je to Wiki, takže vše je editovatelné.

Závěr

První díl seriálu se nachýlil ke konci a nám nezbyvá, než se pustit do hledání podkladů pro tvorbu druhého dílu. Doufáme, že se vám náš průlet dějinami šíření chemických informací líbil a budeme se těšit na další setkání v příštím díle, kdy se podíváme, jak se současnými databázemi pracovat.

Seriál vznikl z inspirace českými infrastrukturami zaměřenými na bioinformatiku a chemoinformatiku: ELIXIR-CZ⁵³ a CZ-OPENSREEN.⁵⁴



⁵¹ <https://www.wikidata.org/wiki/Wikidata:Introduction/cs>

⁵² například chemické pokusy https://cs.wikibooks.org/wiki/Chemick%C3%A9_pokusy

⁵³ <https://www.elixir-czech.cz/>

⁵⁴ <https://www.opensreen.cz/>

Zajíček chemik

