



Korespondenční seminář inspirovaný chemickou tematikou

Ročník 1 (2002/2003)

Série 4



Korespondenční seminář
probíhá pod záštitou
Fakulty chemické technologie VŠCHT Praha
166 28 Praha 6, Technická 5

Milí přátelé chemie a přírodních věd vůbec!

Velice se omlouváme za pozdní odeslání této série, což bude mít za následek absenci série páté. Věříme, že se to nebude v příštích letech opakovat. Letos tedy od nás dostanete ještě jeden dopis s řešením této série a ti šťastnější z vás i přihlášku na soustředění. Více informací se dozvíte v příštím dopise. Ve výsledkové listině 2. série se vyskytly chyby, opravenou ji naleznete na našich stránkách.

Vzhledem k tomu, že se různé zdroje o chemii někdy velice liší, uvádějte prosím k jednotlivým úlohám i seznam použité literatury. Pokud totiž autor čerpá z jiné literatury, která se liší od vaší, liší se i vaše řešení od jeho a on neví, zda-li jste odpověděli špatně nebo jste jen použili jinou literaturu.

Do řešení také pište všechny vaše postupy, neboť i ty bodujeme. Často tedy nestačí pouze odpověď „ano“ či „ne“ nebo pouze číselná hodnota, ale je nutné uvést i postup, jakým jste k výsledku dospěli! Do řešení uveďte raději více než méně věcí, v některých případech totiž za strohou odpověď nemůžeme dát téměř žádné body, ačkoli je správná.

Anketa

Anketu nám vyplnilo celkem 41 řešitelů a řešitelů. 23 se s KSICHTem seznámilo ve škole, 17 na Běstvině a 1 na dnu otevřených dveří. V příštím ročníku bude vycházet seriál o omamných látkách a jedech, neboť tuto možnost zvolilo 19 řešitelů. 10 zájemců si získala alchymie, 8 chromatografie a 3 výbušiny. 29 z vás chce úlohy, které souvisí s každodenním životem, 8 chce úlohy, které se probírají ve škole. Nejvíce se vám líbila úloha „Jak se měl Matýsek o Vánocích“, kterou napsalo 8 lidí, druhé místo patří „Výbušinám“, které dostaly 6 hlasů a o třetí místo se dělí „Analytický obrázek“ a „Otrava oxidem uhelnatým“ s 5 hlasy.

Co se týká vašich připomínek, tak si část z vás oprávněně ztěžovala na příliš krátkou dobu na řešení minulé série. Pokusíme se do budoucna tomuto problému vyhýbat. Části z vás úlohy připadají příliš složité. Je třeba si uvědomit, že úlohy korespondenčního semináře by obecně měly být složitější než třeba úlohy v písemce ze středoškolské chemie. Na jejich řešení máte (obvykle) dost času, můžete o problémech přemýšlet jak dlouho chcete a informace, které nemáte,

můžete nalézt v literatuře. A hlavně - nezoufejte, když nějakou úlohu nemáte na 100 %. Naším záměrem při tvorbě úloh není, abyste je všichni vyřešili na 100 %, takto úspěšní řešitelé jsou opravdu výjimkou. Považte - bavilo by vás řešit úlohy, o kterých byste ihned věděli, že je jen otázkou času, než je vyřešíte na 100 %? Krom toho se snažíme, aby si na své přišli jak zkušenější, tak méně zkušení řešitelé, a proto zařazujeme úlohy složitější i jednodušší.

A pro ty, kteří KSICHT vidí poprvé:

Co to je korespondenční seminář?

Korespondenční seminář je soutěž, při níž si vlastně my (organizátoři) dopisujeme s vámi (řešiteli KSICHTu). Soutěž probíhá během celého školního roku. Řešitelé nám do určeného termínu pošlou zpět vyřešené úlohy. My je poté opravíme, obodujeme a spolu se zadáním úloh další série a autorským řešením úloh série předchozí je zašleme zpět. Po každé sérii též rozešleme průběžné a celkové výsledky. Vítězové budou odměněni věcnými cenami. Na konci školního roku potom ty nejlepší pozveme na soustředění.

Jak by měl vypadat řešitel KSICHTu?

Řešitel KSICHTu je člověk studující na gymnáziu či jiné střední škole, na které se vyučuje chemie. Je to člověk přemýšlivý a rád řeší různé problémy samostatně. Chemie jej baví a rád by se o ní dozvěděl něco nového. Náš řešitel se nebojí zaslat řešení byť jediné úlohy nebo jen řešení částečné - rád se poučí ze svých chyb.

A co úlohy?

Úlohy se zabývají problémy z různých odvětví chemie. Naší snahou je vybírat takové úlohy, aby si v nich každý přišel na své. V každé sérii je pět úloh. Jsou to jak úlohy jednoduché až hravé, které vyřeší i méně zdatní, tak úlohy obtížnější. Úlohy nejsou zaměřené na testování Tvých znalostí. Spíše by měly procvičovat chemickou logiku a schopnost řešit problémy.

Každou úlohu vypracuj na zvláštní papír, uveď název a číslo úlohy! Každou úlohu totiž opravuje jiný člověk. **Nezapomeň se na každý papír podepsat!** Řešení piš čitelně, nemůžeme považovat za správné něco, co nelze přečíst.

Jak se tedy mohu stát řešitelem KSICHTu?

Není nic jednoduššího! Stačí jen na adresu

KSICHT

**Fakulta chemické technologie VŠCHT Praha
Technická 5, 166 28 Praha 6**

(nebo v elektronické podobě na ksicht@host.sk) zaslat řešení dále uvedených úloh. Kromě toho ovšem o Tobě potřebujeme vědět některé informace, které uved' na zvláštní papír (**pokud jsi tyto údaje již jednou posílal(a), znovu tak již činit nemusíš**):

Jméno a příjmení, kontaktní adresa, na kterou Ti budeme posílat zadání a řešení úloh (pokud si přeješ zadání úloh dostávat na e-mail, napiš nám i e-mail, pokud Ti stačí zadání dostávat pouze na e-mail, též nám to sděl), **škola**, na níž studuješ a **ročník**, ve kterém studuješ – studenti víceletých gymnázií uvedou ročník čtyřletého gymnázia, který je ekvivalentní tomu jejich.

KSICHT na internetu

Informace o semináři, zadání a řešení úloh všech sérií (samozřejmě ne řešení série, která právě probíhá), průběžné výsledky a nejnovější informace (např. i errata tištěné podoby série) můžete nalézt na internetu na adrese <http://ksicht.host.sk>. Zde naleznete i kontakt na autory úloh, na něž se můžete kdykoliv obrátit.

4. série úloh 1. ročníku KSICHTu

Série bude ukončena **19. 5. 2003**, úlohy je třeba odeslat nejpozději v tento den (rozhoduje datum poštovního razítka).

Úloha č. 1: Osmisměrka**(12 bodů)**

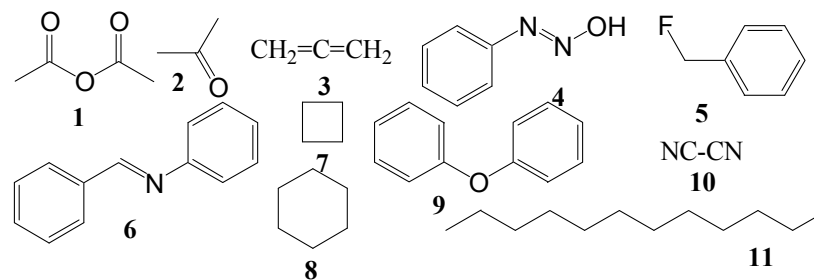
autor: Michal Řezanka, Pavel Řezanka

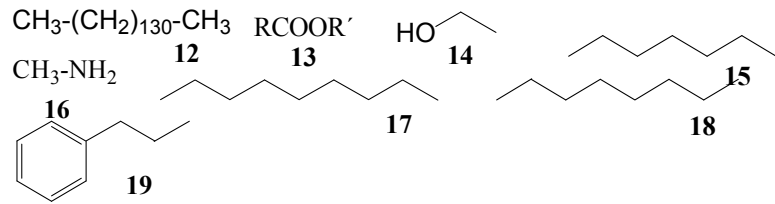
N D B R U C I N N A T U B O L K Y C A
 A U O E N A P U L K D E A A O Y Ž
 Y J R T N I M A N O H C N I C S L N E
 K N N S R Z M P N N Ř Z I E E I I N
 I A E E A I E L D A A L E A T T T I N
 D K O R Y N A N T H E I N A Č M O E
 I E L S A R A K N T N E D S N E N E N
 R D K K U N O I O E Z , I Y H C A T
 O O E F O A S K N N I M A L Y H T E M
 U D R N Y T A E D T O Z V D I P E
 L U G I L V Š B R N O A O A R N E E T
 F L O R O G L U C I N L H N I I H A H
 L C M E E Y C C N C N I Y E D N U P Y
 Y I E S P H H E N Y A M D N K R O U L
 Z T T O U O N A L X O R I I T T R O
 N E R O L I D O L G E N O N B O A I R
 E P I I P C Y K L O H E X A N U B N A
 B E N Z Y L I D E N A N I L I N U C N
 H R E H T E L Y N E F I D A L O N . Ž



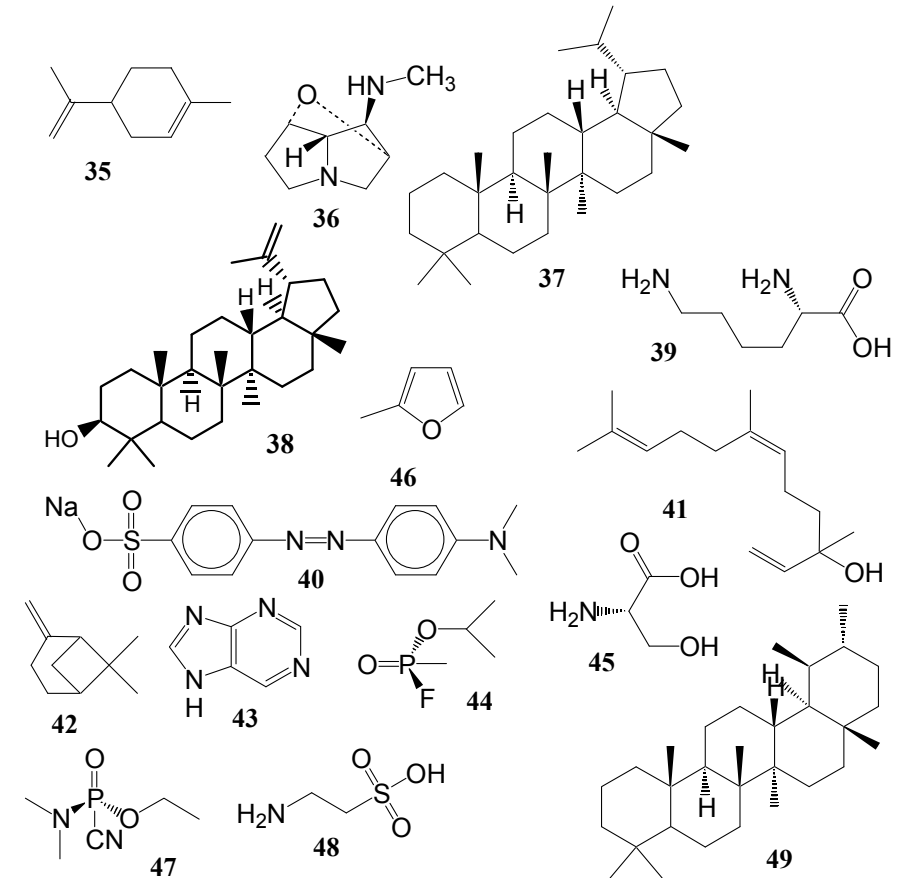
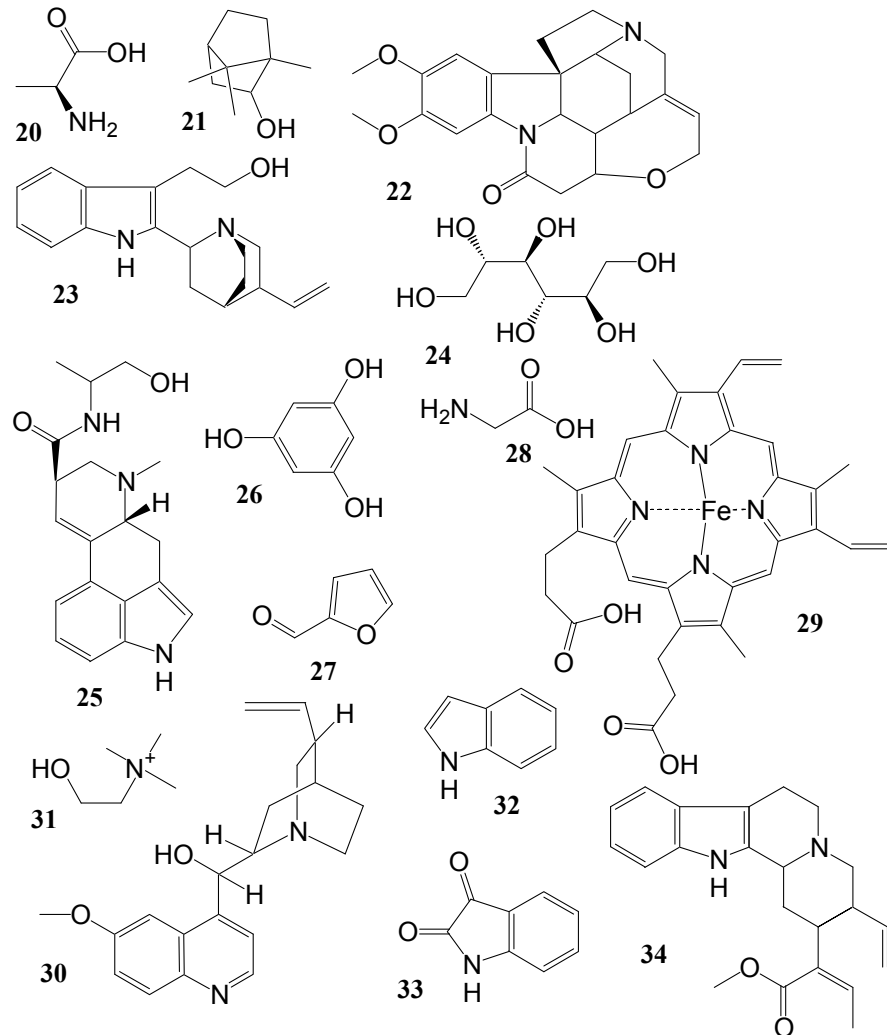
... vtip je uveden v tajence

Jednodušší sloučeniny, u nichž stačí většinou určit systematický název:





Složitější sloučeniny, jejichž název je triviální:



Upozornění: Písmeno CH považujte za dva znaky, tzn. za C a H!

- Každé struktuře přiřaďte odpovídající název (pod každou strukturou je její číslo) a ten potom zaškrtněte v osmisměrce. Tučně označené sloučeniny považujte za zaškrtnuté.

Nápověda: Některé ze složitějších sloučenin se vyskytují v *Strychnos nux-vomica*, kůře *Pseudocinchona africana*, kůře chinové, *Claviceps purpurea*, *Lolium cuneatum*, *Humulus lupulus*, květech pomerančovníku a ve žluči. Dvě z látek jsou silnými nervovými jedy. Seřazení sloučenin také není náhodné.

- Nevyškrtnuté znaky (včetně mezer atd.) tvoří tajenku. Napište ji.
- Kdo je autorem obrázku ke vtipu?

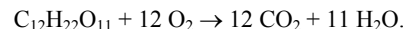
Úloha č. 2: Rum**(6 bodů)**

autor: Richard Chudoba

Rum - lihovina kořeněná či jemné kokosové vůně a chuti. Vyrábí se z cukrové třtiny. Nejprve se z ní extrahuje cukr, který se v podobě sirupu či melasy zkvasí za nepřístupu vzduchu. Vznikne tak roztok obsahující přibližně 10 % ethanolu, který se predestiluje na bezbarvou kapalinu ostré chuti s 80 % ethanolu. Někteří mají tento čerstvý silný rum rádi, ale většinou se nechává zrát ještě rok, tři, pět i déle v malých dubových sudech, ve kterých se předtím připravovala whisky či bourbon. Nakonec se rum při stáčení ředí vodou na obsah alkoholu 37,5 – 60 % vol.

Rum se výborně hodí na přípravu míchaných nápojů. Velice chutná je „Beach Party“. Do šejkru s ledem nalijeme 4 cl světlého rumu, 3 cl pomerančového a 3 cl ananasového džusu a 0,5 cl grenadiny. Suroviny dokonale protřepeme, aby došlo k jejich smísení. Nápoj nalijeme do vinné sklenky, kterou ozdobíme kolečkem ananasu a koktejlou třešní.

Poznámka: Všechny reakce stačí uvádět souhrnně bez detailního vysvětlování biochemických pochodů. Příklad:



Pokud reakce probíhá jen v jednom kroku, napište k ní i enzym, který ji katalyzuje. Není-li uvedeno jinak, jsou zadána hmotnostní procenta.

1. Jaký je rozdíl mezi např. kubánským rumem a tuzemským „rumem“, aneb proč tuzemák žádným rumem není?
2. Jaká chemická látka (případně jejich směs) dává tuzemáku specifickou vůni a chuť?
3. Jaký cukr obsahuje cukrová třtina? Nakreslete jeho Haworthův vzorec. Vyskytuje se stejný cukr i v cukrové řepě?
4. Napište rovnici, která popisuje kvašení při výrobě rumu. Který sacharid (či sacharidy) přímo vstupuje do biochemického cyklu kvasinek, jehož konečným produktem je ethanol? Jestliže tento sacharid (či tyto sacharidy) není přímo obsažen v cukrovém sirupu z cukrové třtiny, запиšte chemickou rovnici, jak z něj vzniká. K čemu by došlo, kdyby kvašení probíhalo za přístupu vzduchu? Dokumentujte chemickou rovnici!
5. Proč po zkvašení cukrového sirupu vznikne roztok jen s přibližně 10 % ethanolu? Spočítejte, kolik procent ethanolu bude obsahovat roztok, který vznikne zkvašením 25% cukrového sirupu získaného z cukrové třtiny.
6. Kolik gramů alkoholu obsahuje sklenka Beach Party připravená podle návodu? Na láhvi rumu je uvedeno 37,5 % vol.

Úloha č. 3: Kouzlo?**(8 bodů)**

autor: Jiří Kysilka

Napětí v sále rostlo, možná i proto, že celá místnost byla zahalena do šera. Jediným zdrojem světla byly plamínky dvou svíček, které plápolaly na kouzelníkově stole. Kouzelník předstoupil před napjaté obecenstvo: „Kouzlo, které jsem si připravil nyní, jen tak někde neuvidíte. Jedná se totiž o hotový zázrak. Zatímco někteří eskamotéři jsou schopni vycvičit zvířata, jako jsou lvi, holubi nebo žáby, já jsem vycvičil plyn v tomto odměrném válci. Naučil jsem jej rozpoznávat barvy. Plyn mě ovšem během výcviku dosti překvapil. Některé barvy si oblíbil.“ Po těchto slovech vytáhl kouzelník svůj kapesní světlo a záhy byli všichni oslněni červeným bleskem ($\lambda = 670$ nm), kterým kouzelník posvítil na svůj cvičený plyn. Napjaté publikum netrpělivě čekalo, co se stane, tím spíš bylo překvapeno tím, že plyn vůbec nijak nezareagoval. Kouzelník ovšem pokračoval: „Jiné barvy ovšem přímo nesnáší.“ Než se diváci nadáli, držel kouzelník v ruce jiný světlo a už se chystal na plyn posvítit jiným světlem. Jak všichni záhy zjistili, šlo o modrý blesk ($\lambda = 430$ nm), ale co víc, v plynu to zajiskřilo a drobnou explozí oznámil, že není příliš nadšen, když se na něj svítí modrým světlem. „Jak vidíte, červené světlo mému plynu nevadí, zatímco modrá mu k srdci zrovna nepřírostla!“ vítězoslavně prohlásil kouzelník.

Kouzelník ovšem netušil, že v jeho publiku je spousta chemiků, kteří tento trik znají a na báchorky o cvičených plynech nevěří. Ve válci vlastně nebyl jeden plyn, ale směs dvou plynů. Oba tyto plyny kouzelník připravil z kyseliny chlorovodíkové. První z nich působením zinku, druhý působením burelu, tedy oxidu manganičitého. V temném prostředí zavedl odpovídající objemy připravených plynů do odměrného válce a před publikem potom pomocí světla inicioval chemickou reakci.

1. Identifikujte oba plyny, které jsou smíchány v kouzelníkově odměrném válci. Napište vyčíslené rovnice chemických reakcí, na jejichž základě si kouzelník plyny připravil. Pro každý plyn navrhněte jeden alternativní způsob přípravy (pokud možno principiálně jiný než kouzelníkův způsob přípravy).
2. Napište vyčíslenou rovnici chemické reakce, která probíhá v odměrném válci. Víte-li, že reakce probíhá radikálovým mechanismem za iniciace světlem, napište tento mechanismus po jednotlivých krocích (iniciace, propagace, terminace).
3. Jak je možné, že modré světlo reakci iniciuje, zatímco červené nikoli? Na základě uvedeného mechanismu vypočítejte, jakou vlnovou délku musí mít světlo, aby bylo schopno iniciovat tuto reakci.

4. Za předpokladu, že všechny plyny se chovají ideálně, vypočítejte, jaký tlak bude ve válci po proběhnutí reakce. Vzhledem k rychlému průběhu reakce předpokládejte, že proběhla adiabaticky (tj. nedošlo k výměně tepla s okolím). Pokud by reakce proběhla izotermicky, pozorovali bychom explozi? Svou odpověď zdůvodněte.
5. A na závěr malá odbočka: proč se v organické chemii běžně neprovádí radikálová fluorace (pomineme-li značně nepohodlnou práci s nebezpečným fluorem), když radikálová chlorace a bromace se v průmyslu i v laboratoři celkem běžně využívá?

Molární tepelné kapacity ideálních plynů za konstantního objemu C_V :

Jednoatomový plyn: $C_V = 3/2.R$, dvouatomový plyn: $C_V = 5/2.R$.

Molární tepelné kapacity ideálních plynů za konstantního tlaku C_p lze zjistit z rovnice:

$C_p - C_V = R$, kde R je molární plynová konstanta ($R = 8,314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$).

Během řešení úlohy se vám bude hodit následující tabulka disociačních energií jednoduchých vazeb. Čísla vyjadřují energii (v $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$), potřebnou k rozštěpení jednoduché vazby mezi uvedenými dvěma prvky (a zcela logicky tedy i energii, která se uvolní při tvorbě této vazby).

	H	C	N	O	S	F	Cl	Br	I
H	435	413	391	463	347	570	431	366	299
C		346	309	257	272	444	339	284	213
N			163			272	201		
O				166		184	217	201	
S					226	297	255	222	
F						153	255	255	
Cl							243	218	214
Br								193	180
I									151

Na závěr malá rada: považujte monochromatické záření o vlnové délce λ za proud fotonů, tj. balíčků energie o velikosti $E = h\cdot c/\lambda$, kde h je Planckova konstanta ($h = 6,626\cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$) a c je rychlost světla ve vakuu ($c = 299\,792\,458 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$).

Úloha č. 4: Zápisky cestovatele aneb úloha termodynamická (12 bodů)

autor: Ondřej Kaman

...Toho rána, již to devátého, co v pohoří Ťan-šanu dlíme, a to v nejvýhodnějším cípu země kyrgyzské, jsme se všichni probudili brzce, neboť zamýšlejíce výstup na samý vrchol Pik Pobědy, bylo nám den vsutku časné započítí. Nikdo z nás netrpěl příznaky horské nemoci, ba nevolno nám nezdálo se též býti, byť náš výškoměr ukazoval téměř neomylně, jako vždy ostatně, šest a půl tisíc metrů nad mořem. Co rána tkne se, toto začalo však v obvyklém sledu; led, jehož teplota stejná teplotě vzduchu byla, minus deset stupňů Celsiových tak obnášejíc, posloužil nám k přípravě ranní kávy, na skromném vařiči propan-butanovém jsme jej rozhráli, a až k varu vsled vodu z něj povstávající přivedli. Čas ubíhal během snídaň vele rychle a my posilivše se jali jsme se vážných příprav ku pokoření vrcholu činiti.

0. Přečtete si pozorně výše uvedený úryvek z deníku cestovatele. (Tato otázka není bodově hodnocena.)
1. Spočtete teplotu, při které bude vřít voda v uvedeném táboře.
2. Určete jak dlouho byste mohli z jedné p-b-láhve vařit každému z vaší čtyřčlenné výpravy dvě ranní kávy. Dále zjistěte, čeho se vám bude nedostávat dříve, oblíbené požitaviny nebo topného plynu.
3. Za jak dlouho po zapnutí hořáku dosáhne voda varu, jestliže připravujete nápoj toliko pro sebe?
4. Porovnejte (procentuálně) spotřebu směsi propan-butanu pod vrcholem Pik Pobědy s její spotřebou při trampování v našich zeměpisných podmínkách, tj. přibližně za standardního tlaku, o výsledcích veďte diskusi. Vodu berete z rybníka (pro slabší povahy je přípustný předpoklad průzračné studánky) o teplotě 10°C .

Potřebné údaje:

Hmotnost vody na přípravu jednoho šálku je 165 g, stanoveno na autorově oblíbeném hrnečku při spotřebě 7,5 g mleté kávy.

Účinnost vařiče napojeného na propan-butanovou láhev: $\eta = 0,65$.

Do hořáku vařiče vstupuje $\approx 4,6\cdot 10^{20}$ molekul/s.

Zbylo vám už jen jedno čtvrtkilogramové balení kávy a jedna plná p-b-láhev s 250 g náplní.

Předpokládané složení topného plynu v hmotnostních procentech 100.w:

Látka	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀
100.w	60	40*

* důkaz přenecháváme laskavě čtenářce/čtenářovi

Složení vzduchu v objemových procentech 100.φ:

Látka	N ₂	O ₂	Ar
100.φ	78	21	1

Konstanty, které doporučujeme použít :

označení	hodnota	rozměr	význam
c _p (H ₂ O(s))	2,062	J.K ⁻¹ .g ⁻¹	Specifická tepelná kapacita při konstantním tlaku
Δh _{tani} (H ₂ O)	333,52	J.g ⁻¹	Specifická entalpie tání
C _p (H ₂ O(l))	75,383	J.K ⁻¹ .mol ⁻¹	Molární tepelná kapacita při konstantním tlaku
ΔH _{vyp} (H ₂ O)	40655	J.mol ⁻¹	Molární výparná entalpie
ΔH _{sp} ^o (C ₃ H ₈)	-2219,9	kJ.mol ⁻¹	Standardní spalná polární entalpie
ΔH _f ^o (C ₄ H ₁₀)	-124,73	kJ.mol ⁻¹	Standardní slučovací entalpie
ΔH _f ^o (H ₂ O(l))	-285,83	kJ.mol ⁻¹	Standardní slučovací entalpie
ΔH _f ^o (CO ₂)	-393,51	kJ.mol ⁻¹	Standardní slučovací entalpie

Barometrická rovnice:

$$[T]: p = p^0 \exp\left(\frac{-\rho^0 gh}{p^0}\right),$$

p je tlak v nadmořské výšce h , p^0 resp. ρ^0 atmosférický tlak při hladině moře (považujeme ho za standardní tlak), resp. hustota vzduchu při hladině moře. Ještě jednou zdůrazněme platnost této formule pouze pro isothermický přechod mezi danými nadmořskými výškami.

Clausiova-Clapeyronova rovnice v integrálním tvaru:

$$\ln \frac{p_2}{p_1} = \frac{\Delta H_{\text{vyp}}}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right),$$

kde p_1 , resp. p_2 značí tlak nasycených par nad kapalinou dané látky při teplotě T_1 , resp. T_2 , ΔH_{vyp} představuje molární výparnou enthalpii. Poznamenejme, že integrace výchozí diferenciální rovnice byla provedena za zjednodušujícího předpokladu nezávislosti výparné enthalpie na teplotě, tedy předpokládáme: $\Delta H_{\text{vyp}} = \text{konst.}$ na intervalu teplot T_1 až T_2 .

Úloha č. 5: Neznámá látka

(10 bodů)

autor: Pavel Řezanka

Tato úloha slouží k procvičení znalostí ze seriálů, tzn., že budete potřebovat informace o ultrafialové, infračervené a hmotnostní spektroskopii (předchozí série) a o nukleární magnetické rezonanci (tato série). Jednotlivé série i se seriály si můžete stáhnout na stránkách KSICHTu.

Náš známý chemik Jeremy objevil jednou v laboratoři staré desky s několika různými spektry dvou látek, o nichž se dozvěděl, že vznikly kyselou hydrolyzou jedné látky. Protože zrovna nasadil reakci a neměl co dělat, rozhodl se, že se pokusí ze spekter vyluštit strukturu látek.

Než byla reakce dokončena, mával vítězoslavně papírem, na kterém měl vyluštěnou strukturu látek a počáteční látku.

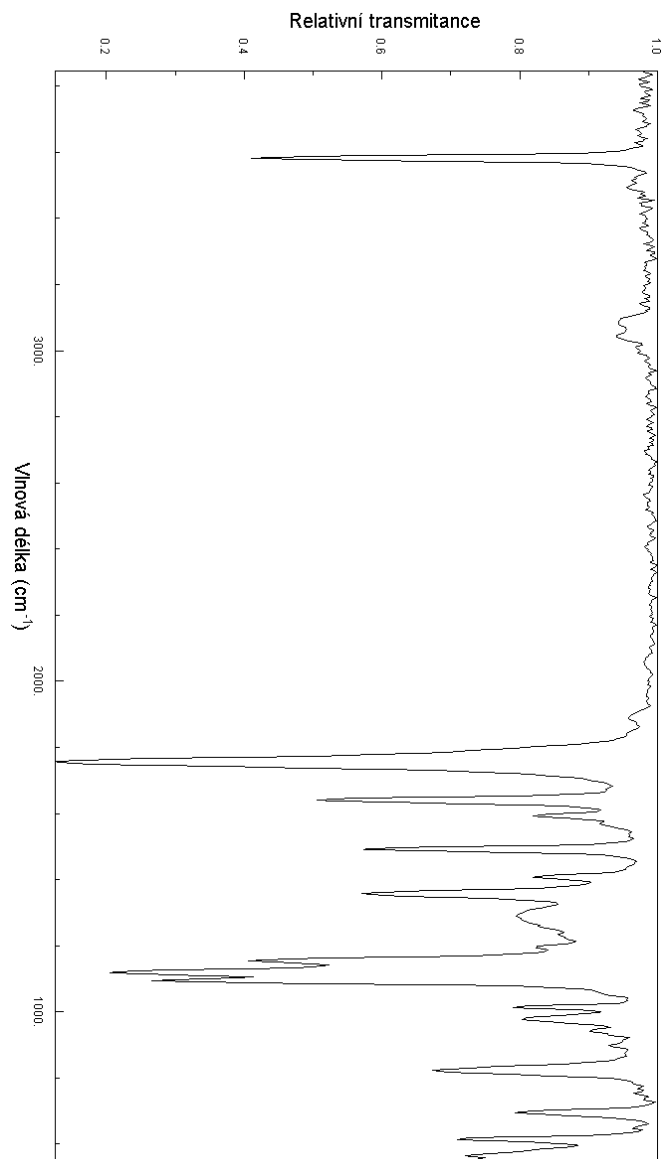
1. Pomocí níže uvedených spekter a údajů identifikujte neznámé látky, nakreslete jejich strukturní vzorec, napište názvy a určete, kolik má každá z látek chirálních center a jak byste určili, o který izomer se jedná. Podrobně popište, jak jste k této struktuře došli.

Z těchto látek určete výchozí látku, vite-li, že byly získány hydrolyzou této neznámé látky.

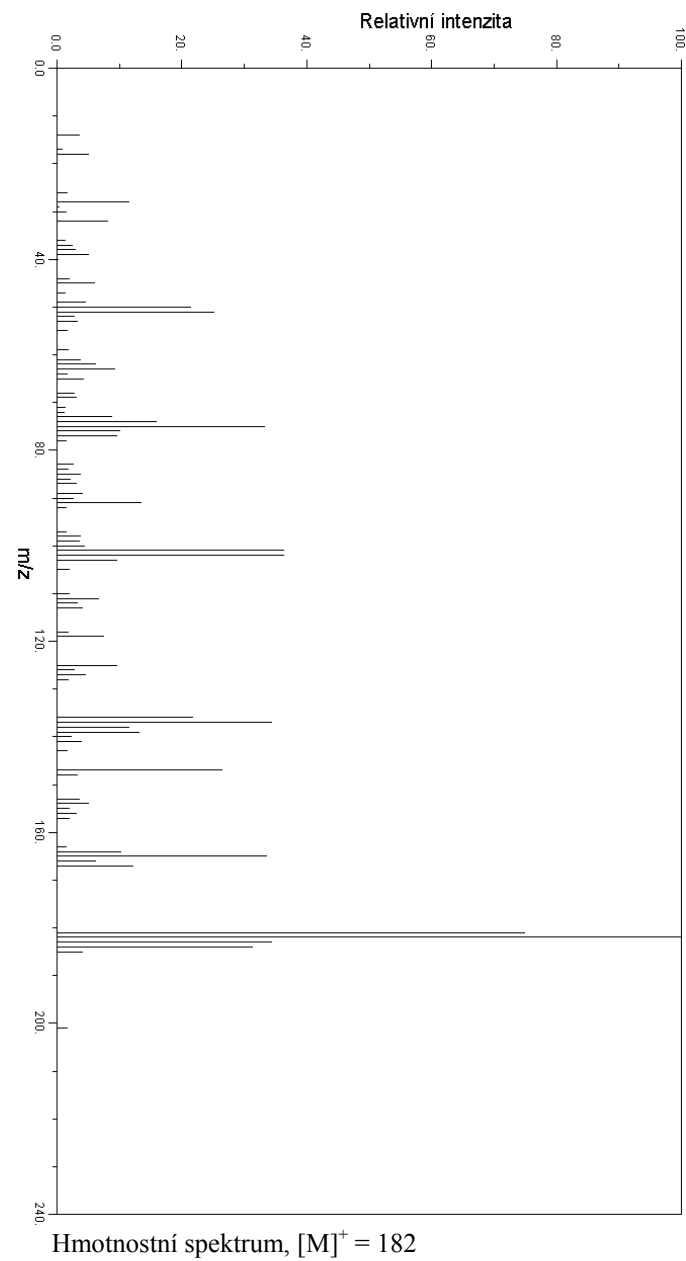
Látka č. 1 absorbuje v UV oblasti, zatímco látka č. 2 nikoliv.

Nápověda: Ve hmotnostním spektru produktu s větší molekulovou hmotností vzniklého reakcí látky č. 1 s roztokem KIO₄ je přítomen [M+2]⁺ ion.

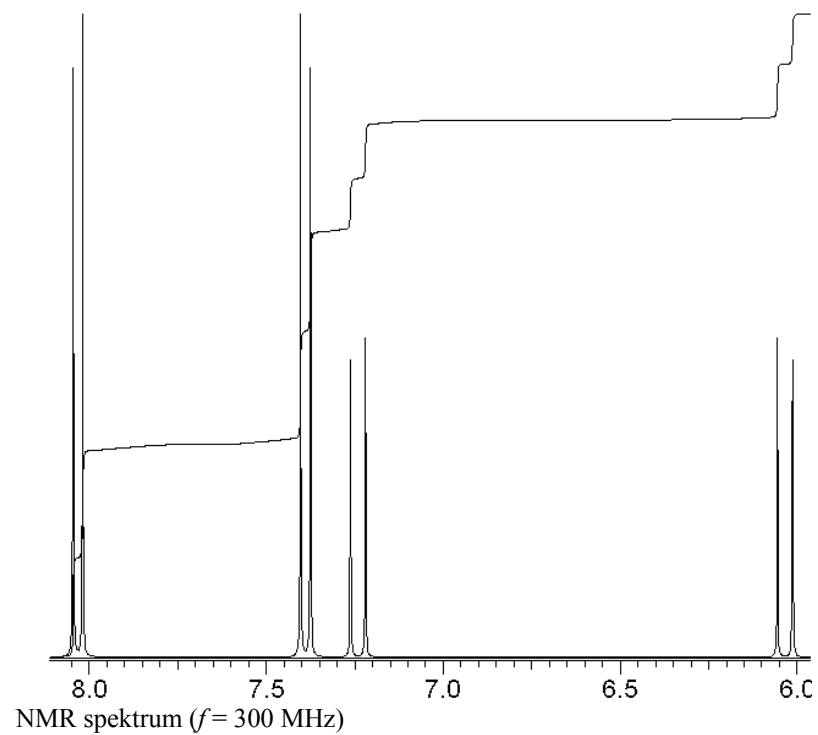
Látka č. 1



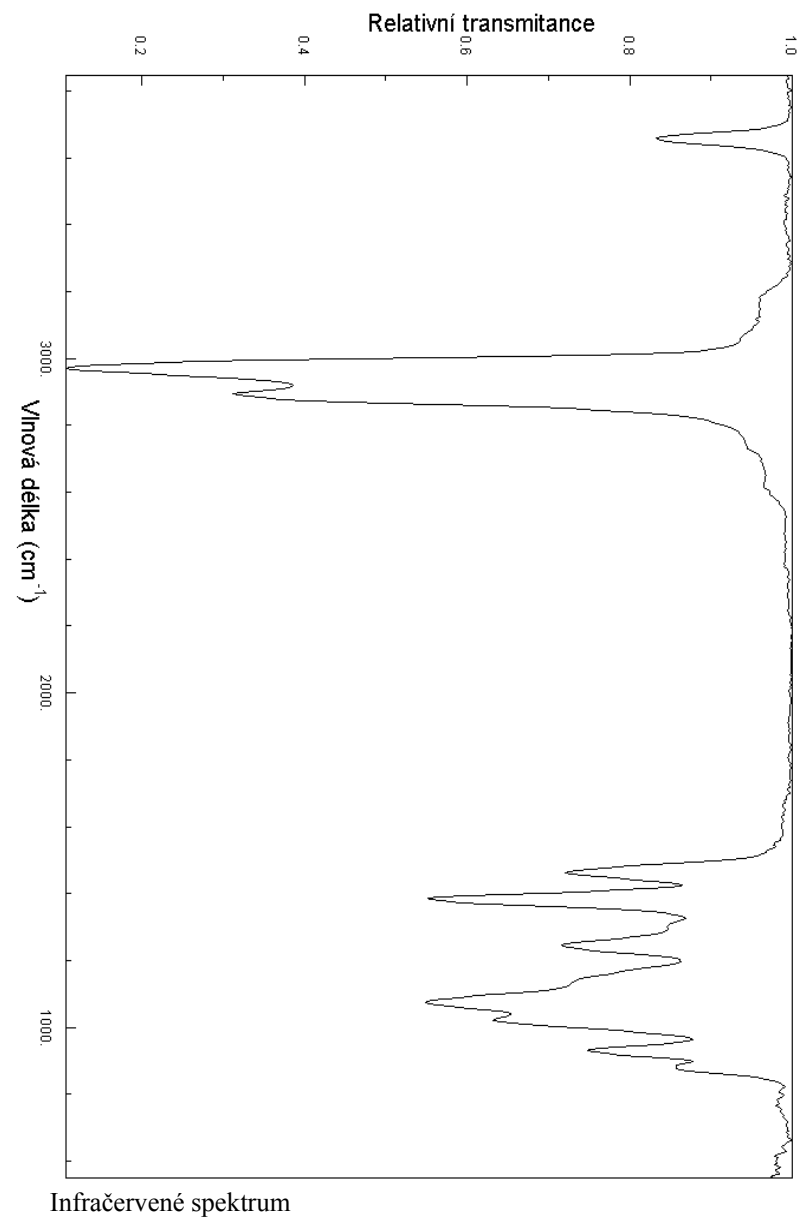
Infračervené spektrum

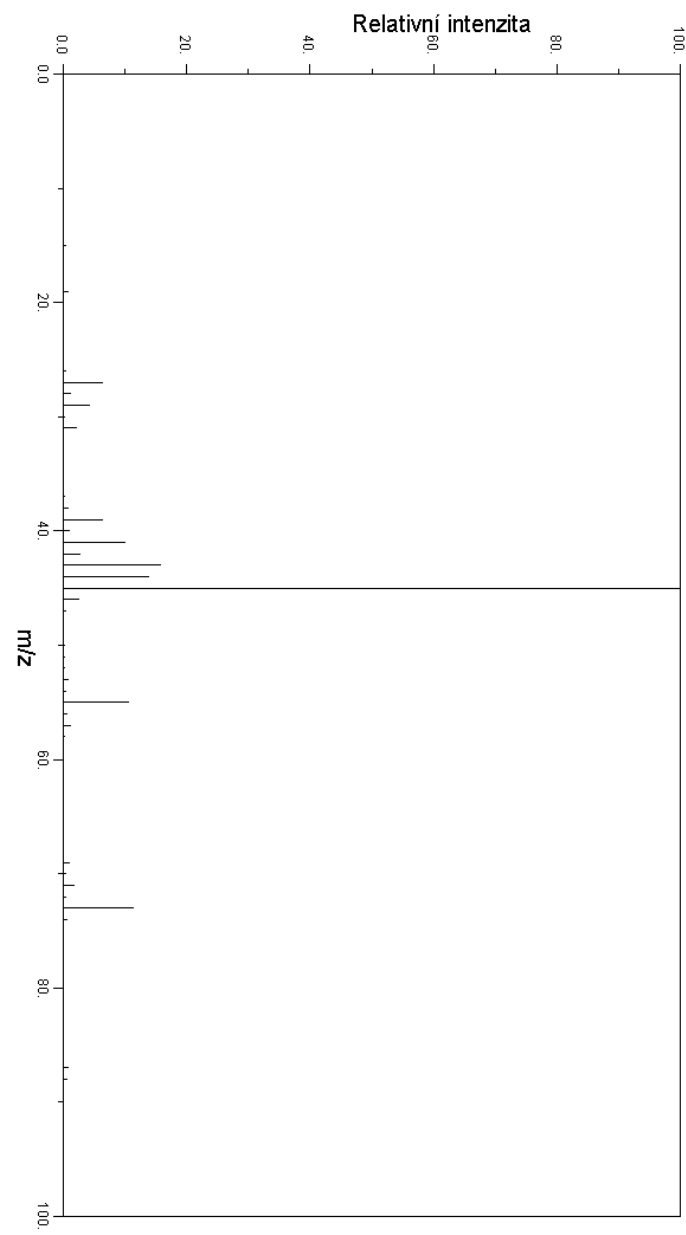


Hmotnostní spektrum, [M]⁺ = 182

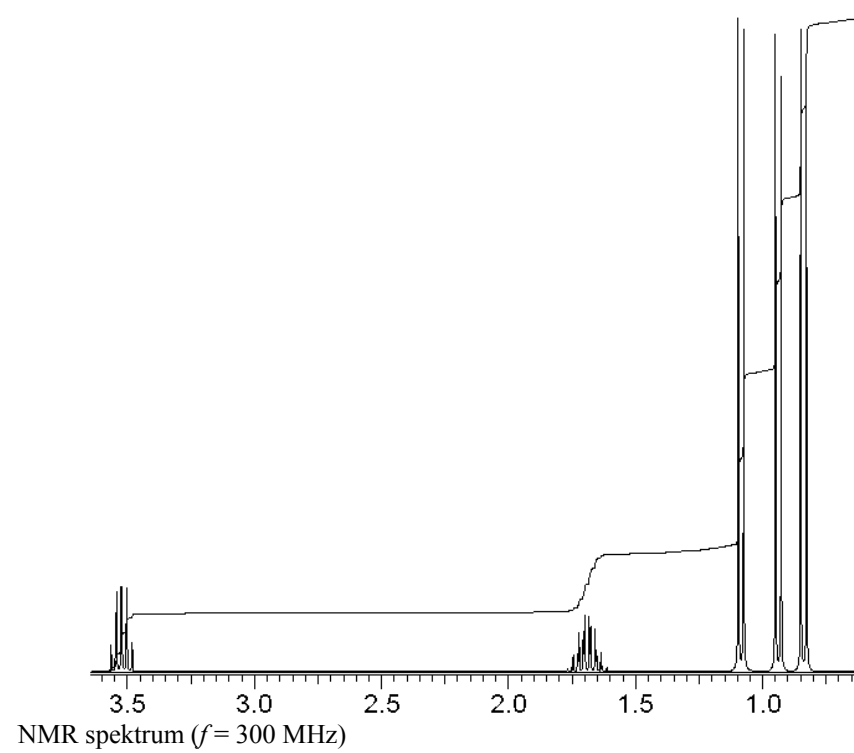


Látka č. 2





Hmotnostní spektrum, $[M]^+ = 88$



Autorské řešení úloh 3. série**Úloha č. 1: Jak se měl Matýsek o Vánocích****(5 bodů)**

autor: Jiří Kysilka

9 – ethylcyklobutan

maminka – cyklopropylfenylmethandiol

tatínek – 2-[diamino(2,5-dimethylcyklopentyl)methyl]propandial

stromeček – cykloheptadekan

cukroví – benzen

prasátko – 1,2,2,3-tetramethylbicyklo[2.1.0]pentan

kapr – spiro[5.5]undekan

kost – (2,3,3,4-tetramethyl-2-pentyl)cyklohexan

zvoneček – 2,6-dimethylpiperidin

dárek – thiofen

kůň – 2-methylbut-2-enal

svíčka – cyklopentanol

televize – cyklookta-2,6-dienon

vločka – 2,6-dimethyl-4-[3-(2,4-dimethylpentyl)]-3,5-(2-propyl)heptan

sluníčko – 3,5,6-trichlorbenzen-1,2,4-triol

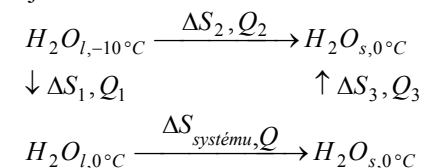
sněhulák – bicyklo[6.4.0]dodekan

hrnec – cyklobutan

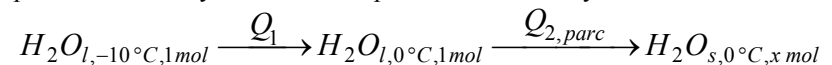
hotový sněhulák – tricyklo[6.6.0.0^{3,6}]tetradekan**Úloha č. 2: Nepořádky s entropií****(6 bodů)**

autor: Karel Berka

Znáznorníme si náš děj:

 ΔS je změna entropie systému a Q je teplo, které se uvolní do okolí.

Pokud ztuhne naše voda rychle, jedná se o adiabatický děj a teplo, které je potřeba k ohřátí systému se získá přeměnou části vody na led. Podle schéma:



$$\text{pak } Q_1 = n \cdot C_p(l) \cdot (t_2 - t_1) = 1.76,1 \cdot [0 - (-10)]$$

$$\text{a } Q_{2, \text{parc}} = -n_{\text{parc}} \cdot \Delta H_{\text{tání}} = -x \cdot 6006,8$$

nuže a $Q_1 + Q_{2, \text{parc}} = 0$, získáme $x = 0,0127$ mol, neboli 12,7 %, což je 2,29 g.Teplota je chvíli skupenské přeměně rovna $0^\circ C$.Teď si spočítáme $\Delta S_{\text{systému}}$, abychom se přesvědčili, zda je nápověda správná

$$\Delta S_1 = n \cdot C_{p,l} \cdot \ln \frac{T_2}{T_1} = 1.76,1 \cdot \ln \frac{273}{263} = 2,84 \text{ J.K}^{-1}$$

$$\Delta S_2 = \frac{n \cdot \Delta H_{\text{tuhnutí}}}{T_{\text{tuhnutí}}} = \frac{-n \cdot \Delta H_{\text{tání}}}{T_{\text{tání}}} = \frac{-1 \cdot 6006,8}{273} = -22,00 \text{ J.K}^{-1}$$

$$\Delta S_3 = n \cdot C_{p,s} \cdot \ln \frac{T_1}{T_2} = 1.37,15 \cdot \ln \frac{263}{273} = -1,39 \text{ J.K}^{-1}$$

$$\Delta S_{\text{systém}} = \Delta S_1 + \Delta S_2 + \Delta S_3 = -20,55 \text{ J.K}^{-1}, \text{ takže správná byla.}$$

Entropie izolovaného systému musí při samovolném ději vzrůst, ale naše podchlazená voda nebyla izolovaná. Při přechodu z kapalného do pevného skupenství se uvolňovalo teplo Q , které zvyšovalo entropii okolí.

$$\Delta S_{\text{okolí}} = \frac{Q_{\text{uvo ln ěné}}}{T_{\text{okolí}}} = \frac{-Q_{\text{spotřebované}}}{T_{\text{okolí}}}$$

$$Q_1 = n \cdot C_{p,l} \cdot (T_2 - T_1) = 1 \cdot 76,1 \cdot (273 - 263) = -761,0 \text{ J}$$

$$Q_2 = n \cdot \Delta H_{\text{tuhnutí}} = -\Delta H_{\text{tání}} \cdot n = -6006,8 \cdot 1 = -6006,8 \text{ J}$$

$$Q_3 = n \cdot C_{p,s} \cdot (T_1 - T_2) = 1 \cdot 37,15 \cdot (263 - 273) = -371,5 \text{ J}$$

$$Q_{\text{uvolněno}} = -Q_{\text{spotřebované}} = -(Q_1 + Q_2 + Q_3) = 6396,3 \text{ J}$$

$$\Delta S_{\text{okolí}} = \frac{Q}{T_1} = \frac{6396,3}{263} = 24,32 \text{ J.K}^{-1}$$

$$\Delta S = \Delta S_{\text{systém}} + \Delta S_{\text{okolí}} = -20,55 + 24,32 = 3,77 \text{ J.K}^{-1} > 0$$

Takže nakonec se jedná opravdu o samovolný děj, jak se můžeme přesvědčit občas v zimních měsících venku a častěji doma v mrazáku.

Úloha č. 3: Sodík a draslík v hornině (6 bodů)
autor: Jakub Fiala

- A - CaCO_3 (0,3)
 - B - NH_3 (0,3)
 - C - NaHSO_4 , KHSO_4 (0,3)
 - D - $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_7$, $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_7$ (0,3)
 - E - Na_2SO_4 , K_2SO_4 (0,3)
 - např. AAS, AES (0,2)
 - Na^+ (Za každou sloučeninu 0,3 maximálně 0,6)
 - $\text{Zn}(\text{UO}_2)_3(\text{CH}_3\text{COO})_8$
 - $\text{K}[\text{Sb}(\text{OH})_6]$
 - $\text{Mg}(\text{UO}_2)_3(\text{CH}_3\text{COO})_8$
- K^+ (Za každou sloučeninu 0,3 maximálně 0,9)
- H_2PtCl_6

- HClO_4

- $\text{Na}_3[\text{Co}(\text{NO}_2)_6]$

- $\text{Na}[\text{B}(\text{C}_6\text{H}_5)_4]$

- $\text{NaPb}[\text{Co}(\text{NO}_2)_6]$

4. CaCO_3 se přidává na snížení bodu tání sloučenin Na a K a vázání SiO_2 (CaSiO_3) (0,8)

5.

$$2 \cdot n_1 \cdot M_{\text{NaCl}} + 2 \cdot n_2 \cdot M_{\text{KCl}} = m_{\text{Chloridy}}$$

$$n_1 \cdot M_{\text{Na}_2\text{SO}_4} + n_2 \cdot M_{\text{K}_2\text{SO}_4} = m_{\text{Sirany}}$$

n_1 počet molů Na

n_2 počet molů K

$$m_1 = 0,8100 \text{ g}$$

$$m_2 = 0,9646 \text{ g}$$

Na tomto místě bych se chtěl omluvit za chybu, která se vloudila do zadání mé úlohy (hmotnost síranů měla být poloviční) a proto hmotnost draslíku vyšla záporně. ""Vše pravděpodobně zavinil tiskařský šotek"" .;-)

Z výše uvedené soustavy rovnic plyne

$$m_{\text{K}} = 0,2228 \text{ g}$$

$$m_{\text{Na}} = 0,1515 \text{ g}$$

(2,0)

Úloha č. 4: Výbušiny (13 bodů)
autor: Robert Betík

- a) Semtex
 - b) $4 \text{HCHO} + \text{CH}_3\text{CHO} + \text{H}_2\text{O} = (\text{CH}_2\text{OH})_4\text{C} + \text{HCOOH}$
 - c) $P = 1060 \text{ GW}$. Nejprve vypočítáme objem nálože V ($V = m/\text{hustota}$), pak poloměr r a pak čas t , za který celá nálož explodovala $t = r/v.d$. Vypočítáme energii E uvolněnou výbuchem. Výkon je pak $P = E/t$.
 - d) $V = 12,86 \text{ m}^3$. Vycházíme ze stavové rovnice ideálního plynu: $p.V = n.R.T$. Vypočítáme kolik molů má 1 kg PETN. Při výbuchu jich vznikne 11-ti násobek. Teplota a tlak jsou zadány, R je konstanta.

e) $p = 2,28 \text{ GPa}$. Opět vycházíme ze stavové rovnice ideálního plynu: $p.V = n.R.T$. Teplotu známe, R je konstanta. Za V (objem plynu je stejný jako objem nálože) dosadíme $m/\text{hustota}$, za n dosadím $11 (m/M_r)$ (M_r je molární hmotnost PETN, při výbuchu vzniká 11 molů plynů z 1 molu PETN), m se vykrátí a vypočítáme p .

Pro výrobu rozbušky je třeba použít třaskavinu. Azid Pb je třaskavina, a proto je právě on vhodný pro tento účel. Z tohoto důvodu nelze azid Pb použít k žádnému jinému úkolu. Kumulační nálože vyžadují velké detonační rychlosti a vysokou hustotu energie (tj. energie na jednotku objemu). Lisovaný hexogen má tyto vlastnosti. Trhání skal v kamenolomu neklade na výbušné vlastnosti trhavin takřka žádné omezení (stačí, aby látka byla trhavinou) používá se proto levně, ne však tak účinně, trhaviny jako Permonex 19 atp. K řezání ocelových hranolů je třeba, aby výbušina byla co nejtěsněji přiléhala k onomu hranolu, je proto velkou výhodou, když je plastická. C-4 je americká plastická trhavina.

Z uvedených údajů by se nepodařilo spočítat detonační tlak ani přibližně. Deflugační rychlost je totiž v porovnání s detonací velmi malá, a proto zplodiny stihnou expandovat, než střelný prach dohoří. Tlak je pochopitelně mnohem menší, než při detonaci PETN. Z uvedeného plyne, že brokovnice by skončila roztrhaná na kousky, které by se rozlétly do okolí jako střepiny granátu. Myslivec by to pravděpodobně nepřežil. Zato zajíček by možná, kdyby mu štěstí přálo, přežil, protože broky by měly asi stejnou rychlost jako jiné střepiny, a ta by byla menší, než rychlost při normálním výstřelu.

Úloha č. 5: Exkurz do struktury látky ovlivňující běh starověkého Říma (12 bodů)

autor: Tomáš Mikulka

1. Určení sumárního vzorce neznámé látky

a) určení obsahu dusíku

$$V = 0,823 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3, T = 298,15 \text{ K}, p = 98,2 \text{ kPa}, m_1 = 8,37 \cdot 10^{-3} \text{ g},$$

$$A_r(\text{N}) = 14,01, n = ?, w_{\text{N}} = ?$$

Z takto zadaných veličin vede jen nepatrný krůček ke stavové rovnici ideálního plynu:

$$n = p.V/(R.T) = 3,26 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$$

Pro výpočet procentuálního zastoupení dusíku v látce lze jednoduchou úvahou sestavit vztah (1):

$$w_{\text{N}} = (2.n.A_{r(\text{N})}/m_1) \cdot 100 \% \quad (1)$$

$$w_{\text{N}} = 10,9 \% \quad (1 \text{ bod})$$

b) zjištění zastoupení C, H, popřípadě O
 $m_2 = 11,2 \cdot 10^{-3} \text{ g}, m(\text{CO}_2) = 30,9 \cdot 10^{-3} \text{ g}, m(\text{H}_2\text{O}) = 13,5 \cdot 10^{-3} \text{ g}, A_r(\text{C}) = 12,01,$
 $A_r(\text{H}) = 1,008, A_r(\text{O}) = 16,00, w_{\text{C}}, w_{\text{H}}, w_{\text{O}} = ?$

$$\text{obsah C: } n(\text{C}) = n(\text{CO}_2)$$

$$n(\text{CO}_2) = m(\text{CO}_2)/M(\text{CO}_2)$$

$$m(\text{C}) = n(\text{CO}_2) \cdot A_r(\text{C})$$

$$w_{\text{C}} = (m(\text{C})/m_2) \cdot 100\%$$

$$w_{\text{C}} = 75,3 \% \quad (1 \text{ bod})$$

$$\text{obsah H: } n(\text{H}) = 2n(\text{H}_2\text{O})$$

$$n(\text{H}_2\text{O}) = m(\text{H}_2\text{O})/M(\text{H}_2\text{O})$$

$$m(\text{H}) = 2n(\text{H}_2\text{O}) \cdot A_r(\text{H})$$

$$w_{\text{H}} = (m(\text{H})/m_2) \cdot 100\%$$

$$w_{\text{H}} = 13,5 \% \quad (1 \text{ bod})$$

obsah O: tento zjistíme z velmi prostého výpočtu, protože předpokládáme, že se látka neskládá z více než těchto čtyř elementů $w_{\text{O}} = 100\% - w_{\text{N}} - w_{\text{H}} - w_{\text{C}}$

$$w_{\text{O}} = 0 \% ,$$

a to přibližně, takže můžeme s klidným svědomím konstatovat, že se v molekule zkoumané látky nevyskytuje kyslík.

c) vyšetření sumárního vzorce sloučeniny

Z předchozích dvou bodů jasně vyplývá, že je potřeba odhalit stechiometrické koeficienty v obecném vzorci $\text{C}_x\text{H}_y\text{N}_z$.

$$x:y:z = (w_{\text{C}}/A_r(\text{C})):(w_{\text{H}}/A_r(\text{H})):(w_{\text{N}}/A_r(\text{N})) = 6,27:13,30:0,78,$$

protože je docela možné, že poslední koeficient bude roven 1, zkusíme rovnici podělit číslem 0,78:

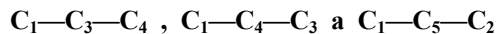
$$x:y:z = 8:17:1, \text{ čímž jsme zjistili poměrné zastoupení prvků v hledané látce.}$$

Takto dosažené poznatky můžeme spolu se znalostí o omezení molekulové hmotnosti shrnout do sumárního vzorce, který je považován za výsledek této části:

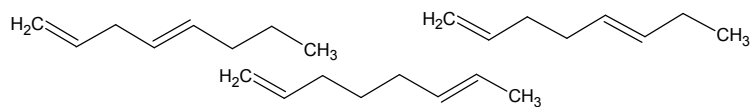


2. Struktura látky

V minulém úkolu jsme zjistili, že sloučenina obsahuje 8 uhlíků, z první části nápovědy vyplývá, že řetězec uhlíků byl od počátku celistvý. Pro zjednodušení zapisování různých kombinací zavedme značení: methanal: C_1^- , ethanal: C_2^- , propanal: C_3^- , butanal: C_4^- , propan-1,3-dial: $-\text{C}_3^-$, butan-1,4-dial: $-\text{C}_4^-$, pentan-1,5-dial: $-\text{C}_5^-$. Víme tedy, že jejich kombinací musíme dostat vždy C8 řetězec, v druhé části nápovědy stálo, že při každém štěpení vzniká směs různých produktů, tzn. že musíme skládat fragmenty vždy o různé identity. Po aplikaci těchto podmínek zbývají ze všech možných kombinací tyto:

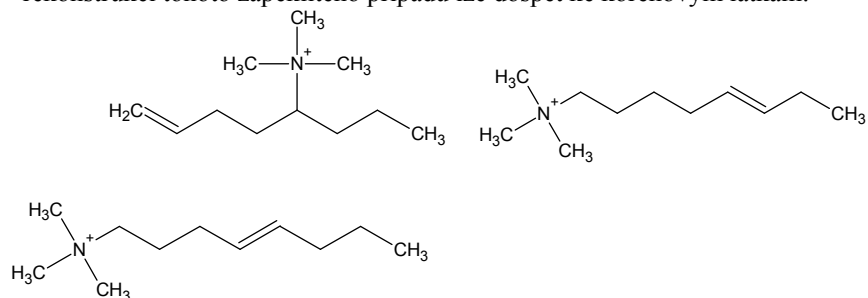


Z těchto schémat můžeme vyvodit tyto struktury sekundárně vzniklých olefinů:



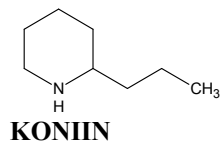
(2 body)

Dále je ze zadání zřejmé, že tyto produkty vznikly z původních tří, kteréžto byly aminoalkeny, resp. tetraalkylamoniové hydroxidy. Složitější prostorovou rekonstrukcí tohoto zapeklitého případu lze dospět ke kořenovým látkám:



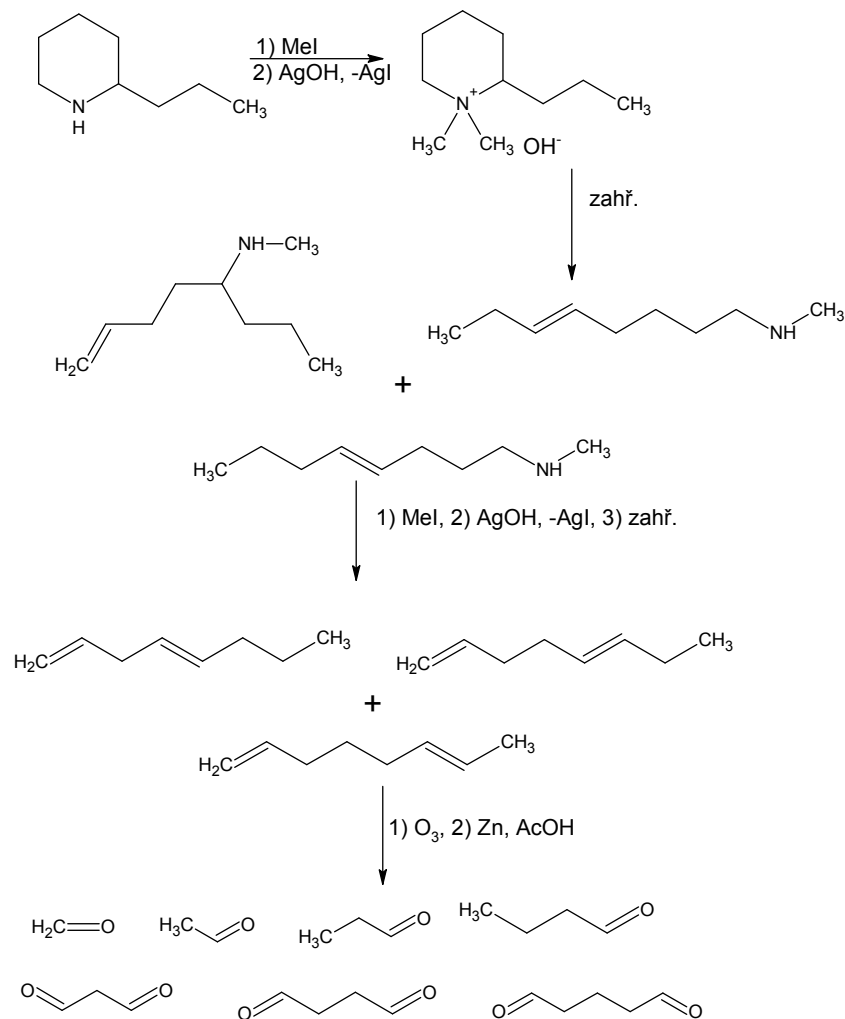
(1,5 bodu)

V této fázi je již jen krůček k matečné sloučenině:



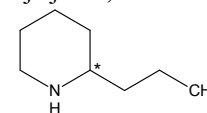
(1 bod)

Tento sled reakcí byl jakousi retrospektivou, která možná není někomu úplně srozumitelná, proto zde uvádím sekvenci reakčních kroků tak, jak jich byli svědky němečtí chemikové:

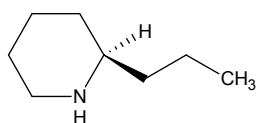


3. Hledání izomerů

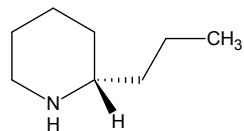
Ze struktury alkaloidu je jasné, že obsahuje 1 chirální centrum:



To také znamená, že existuje 2¹ izomerů následujících struktur:



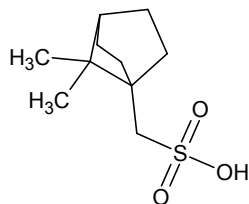
(2R)-2-propylpiperidin



(2S)-2-propylpiperidin

(1 bod)

Poněvadž se jedná o chirální organickou bázi, bylo by možné ji rozštěpit na izomery krystalizací vnanů, popřípadě kafr-10-sulfonátů.



(7,7-dimethylbicyclo[2.2.1]hept-1-yl)methansulfonová kyselina

Koniin se vyskytuje zejména v rostlině **bolehlav plamatý** (*Conium maculatum*). Přirozený je D-(+)-koniin (S-izomer).

(1,5 bodu)

Seriál

Během každého ročníku probíhá seriál, při jehož čtení se můžeš dozvědět spoustu zajímavých a užitečných informací, které se Ti mohou hodit jak při řešení úloh KSICHTu, tak při dalším studiu chemie. A zde je poslední díl seriálu o **spektrálních metodách v chemii**, který pro vás připravoval Pavel Řezanka.

4. Nukleární magnetická rezonance (NMR)

Podle chování v magnetickém poli lze jádra všech prvků rozdělit do dvou skupin:

- jádra s magnetickým momentem
- jádra bez magnetického momentu

Nukleární magnetickou rezonanci lze vyvolat jen u jader s magnetickým momentem. Mezi ně patří jádra, která mají lichý počet protonů nebo nukleonů. Z praktického hlediska se jeví jako nejvýznamnější NMR jader o kvantovém čísle $\frac{1}{2}$ (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P). Hovoříme potom o $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$, $^{15}\text{N-NMR}$... spektroskopii. Jádra s větším spinovým kvantovým číslem (^2H , ^{10}B , ^{11}B , ^{14}N , ^{17}O) dávají příliš složitá NMR spektra a jsou tedy méně vhodná pro praktickou aplikaci.

Mezi jádra bez magnetického momentu patří třeba ^{12}C a ^{16}O , a proto je, i když se často vyskytují v organických molekulách, nemůžeme měřit.

NMR spektrometr

Při NMR spektroskopii je nejčastěji kapalný vzorek umístěn mezi póly silného elektromagnetu. Působením tohoto magnetického pole dochází k energetickému odlišení mezi oběma spinovými stavy. Při měření je vzorek ozařován vysokofrekvenčními pulsy (předávání energie vzorku, excitace), jejíž důsledkem je přechod z jednoho spinového stavu do druhého. Při relaxaci do původního stavu dochází k uvolnění energie, která je registrována (závislost energie na čase) a Fourierovou transformací převedena na spektrum (závislost intenzity signálu na frekvenci).

Interpretace NMR spektra

Na osu x NMR spektra obvykle nebývá vynášena frekvence, ale **chemický posun δ** , což je bezrozměrná veličina uváděná obvykle v ppm (part per million) pro kterou platí:

$$\delta = \frac{\nu - \nu_0}{f},$$

kde δ je chemický posun v ppm, ν je naměřená frekvence, ν_0 je frekvence odpovídající standardu a f je frekvence přístroje v MHz. Tento přepočít zaručuje,

že i když měříme tu samou látku na přístrojích s různou frekvencí, vždy nalezneme signál měřený látky na stejném místě ve spektru. Na osu y je vynášena relativní intenzita signálu.

Při NMR spektroskopii se pro jednotlivé signály získají následující údaje:

- chemický posun
- intenzita
- multiplicita

Chemický posun

Charakteristickou vlastností NMR spektroskopie je, že atomy vázané v molekule různým způsobem dávají signály svých jader v odlišných oblastech NMR spektra. Tak například methylová skupina v ethanolu budeme mít jiný chemický posun než methylová skupina v methoxybenzenu. Tento jev lze vysvětlit rozdílným stíněním jader elektrony. Jediný signál v NMR spektru lze očekávat, pokud bude látka obsahovat pouze magneticky ekvivalentní atomy (tzn., že mají shodné okolí). Zjistí se to velice jednoduše. Pokud totiž nahradíme kterýkoliv z ekvivalentních atomů jiným atomem, musíme pokaždé získat stejnou látku. Jako příklad lze uvést methan, ethan, cyklohexan, benzen (tyto látky budou mít sice pouze jeden signál, ale budou se lišit svým chemickým posunem). Pokud tedy například u benzenu nahradíme jeden vodík chlorem, dostaneme chlorbenzen. Pokud nahradíme jiný vodík v benzenu chlorem, dostaneme také chlorbenzen.

Intenzita signálu

Integrální intenzita signálů, která je vyjadřována pomocí plochy signálů, je přímo úměrná počtu jader, které vyvolaly při dané energii vznik signálu, a informuje nás o počtu stejných (magneticky ekvivalentních) atomů představujících jeden signál v NMR spektru. Tak například v $^1\text{H-NMR}$ spektru acetaldehydu budou signály v poměru 3:1 (signál o intenzitě 3 patří methylu (tři vodíky), signál o intenzitě 1 patří aldehydické skupině (jeden vodík)), v propanu budou signály v poměru 3:1 (v této molekule je 6 methylových vodíků a 2 methylenové vodíky, tzn. 6:2, po zkrácení 3:1), v tetrahydrofuranu (THF) v poměru 1:1 (v THF je 8 vodíků v poměru 4:4, po vykrácení je poměr 1:1), v toluenu v poměru 1:2:2:3 (v para poloze vzhledem k methylu je jeden vodík, v meta a v ortho poloze je po dvou atomech vodíku a methyl má 3 vodíky). V $^{13}\text{C-NMR}$ spektru budou signály u stejných látek postupně 1:1, 1:1 a 1:2:2:1:1.

Multiplicita

Další informaci nám poskytuje **multiplicita signálů**. Každý jednotlivý signál může být vlivem svého okolí rozštěpen na jednotlivé linie. V nejjednodušším

případě platí, že počet linií v signálu $^1\text{H-NMR}$ spektra odpovídá počtu atomů vodíku na sousedních atomech uhlíku **zvětšenému o 1**. Podle počtu linií pak hovoříme o **singletu** (s, 1 linie), **doubletu** (d, 2 linie v poměru 1:1), **tripletu** (t, 3 linie v poměru 1:2:1), **kvartetu** (nebo kvadrupletu) (q, 4 linie v poměru 1:3:3:1), **multipletu** (m, mnoho linií, ale může se jednat třeba i o triplet, které se překrývají, a proto je nelze identifikovat) atd. Pokud je atom štěpen různými (magneticky neekvivalentními) atomy vodíku, píšou se počty linií za sebe, tzn.: dd = dublet doubletu, qt = kvartet tripletu atp. **Upozornění:** uvedený poměr linií musí vždy souhlasit. Pokud tedy nalezneme ve spektru 3 linie, které **nejsou** v poměru 1:2:1, potom se **nejedná** o triplet.

Výše uvedený acetaldehyd představuje výjimku, neboť vodík na aldehydické skupině neštěpí, tudíž uvidíme ve spektru dva singlety v poměru intenzit 3:1.

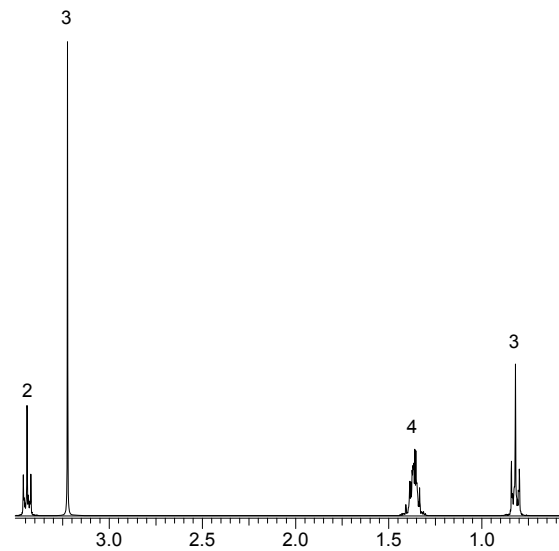
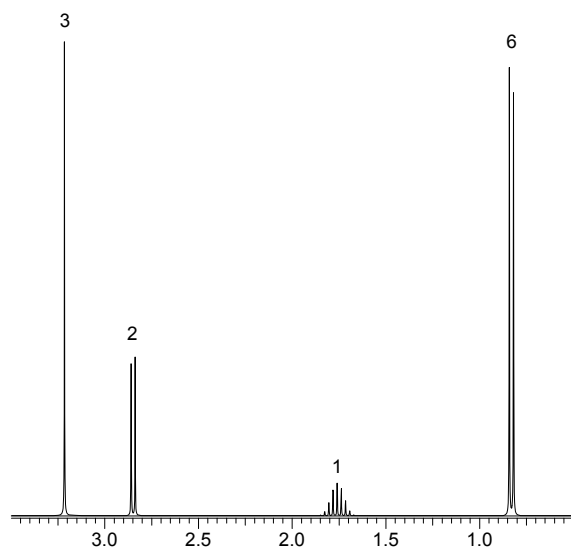
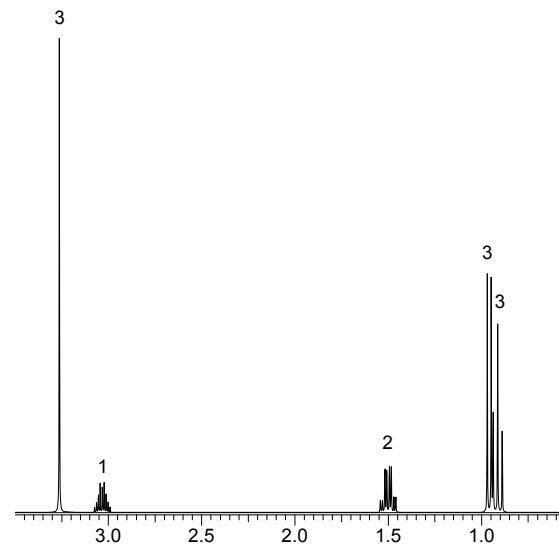
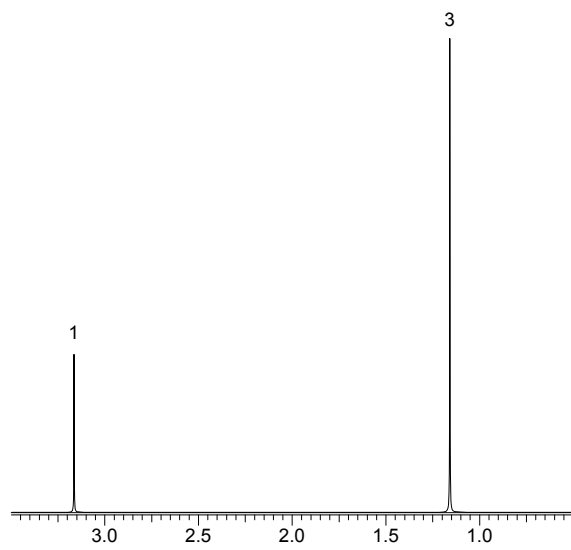
Spektrum propanu nám poskytne triplet o intenzitě 3 (v okolí methylů jsou 2 vodíky methylenové skupiny) a heptaplet (v tomto případě už mluvíme o multipletu, neboť jednotlivé linie lze jen obtížně rozpoznat) o intenzitě 1 (v okolí methylenové skupiny je 6 methylových vodíků).

U THF bude situace složitější. Methylenové skupiny dále od atomu kyslíku budou triplet tripletu o intenzitě 1 (methylenová skupina (v poloze 3) je štěpena dvěma sousedními methylenovými skupinami (v polohách 2 a 4), přičemž tyto skupiny nejsou chemicky ekvivalentní, tzn., že se atomy vodíků v okolí nesčítají (jako v případě propanu), ale jedná se vždy o další štěpení) a methylenové skupiny (v poloze 2) blíže k atomu kyslíku budou triplet o intenzitě 1 (v okolí je atom kyslíku, který nemá na štěpení vliv, ale má vliv na chemický posun, a methylenová skupina, která způsobuje štěpení na triplet).

V toluenu je situace složitější, neboť v konjugovaném systému lze pozorovat štěpení i od vzdálenějších atomů vodíku, ale každopádně uvidíme singlet o intenzitě 3 patřící methylu.

Níže jsou uvedeny 4 spektra methoxybutanů (1-methoxybutan, 2-methoxybutan, 1-methoxy-2-methylpropan a 2-methoxy-2-methylpropan). Pokuste se přiřadit jednotlivá spektra jednotlivým izomerům dříve, než si přečtete vysvětlení. Nápodvěda: nejdříve si nakreslete všechny výše uvedené struktury a určete, kolik mají chemicky ekvivalentních atomů vodíku.

Nad jednotlivými signály je vždy uvedena jejich intenzita. V praxi se ale do spektra vynášejí integrální křivka (viz úloha 5), která znázorňuje integrální intenzitu signálů a je tedy přímo úměrná počtu atomů vodíku.



Methoxybutan má 12 atomů vodíku, tzn., že v prvním spektru jsou v poměru 9:3, což znamená, že v molekule jsou přítomny 2 různé skupiny vodíků. 3 vodíky o intenzitě 1 zřejmě odpovídají methoxyskupině. Zbývající vodíky musí být chemicky ekvivalentní, tzn., že se bude jednat o 3 methylové skupiny (vzhledem k tomu, že máme k dispozici ještě 4 atomy uhlíku a 9 atomů vodíku, je zřejmé, že jiná možnost není). Jedná se tedy o spektrum 2-methoxy-2-methylpropanu.

Na dalším spektru už snadno najdeme singlet od methoxyskupiny, který má velmi podobný chemický posun. Dublet o intenzitě 6 nám říká, že v sousedství je pouze jeden vodík. 6 stejných atomů vodíku jsou 2 methylové skupiny, které jsou vázány na uhlík s jedním atomem vodíku. Signály o intenzitě 6 a 1 tedy odpovídají isopropyl skupině. Dublet je štěpen pouze jedním vodíkem, tzn., že se jedná o CH_2 skupiny vázanou na CH skupinu. Druhá vazba u CH_2 skupiny tedy směřuje na atom bez vodíků, v našem případě tedy na kyslík. Jedná se tedy o 1-methoxy-2-methylbutan.

Na třetím spektru opět snadno identifikujeme methoxyskupinu. Dublet a triplet o intenzitě 3 budou methylové skupiny vázané na CH (multiplet o intenzitě 1) a na CH_2 (multiplet o intenzitě 2) skupinu. CH a CH_2 skupina tedy musí být mezi sebou spojeny C-C vazbou. Na CH skupině je ještě navíc vázaná methoxyskupina. Výsledná látka je tedy 2-methoxybutan.

Poslední spektrum také vykazuje singlet indikující methoxyskupinu. Triplet o intenzitě 3 bude methyl vázaný na CH_2 skupinu. Triplet o intenzitě 2 bude CH_2 skupina, na kterou je vázán kyslík a další CH_2 skupina. Multiplet o intenzitě 4 jsou 2 CH_2 skupiny, jejichž posuny jsou tak blízké, že se překrývají a ve spektru se pak jeví jako jeden multiplet. Spektrum tedy odpovídá 1-methoxybutanu.

V praxi se ovšem neuvádějí spektra, ale přepisují se do textové podoby. Jednotlivá spektra by tedy byla zapsána takto:

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) 1,16 (s, 9H), 3,16 (s, 3H)

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) 0,83 (d, $J = 6,7$ Hz, 6H), 1,76 (m, 1H), 2,85 (d, $J = 6,6$ Hz, 2H), 3,21 (s, 3H)

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) 0,91 (t, $J = 7,3$ Hz, 3H), 0,96 (d, $J = 6,3$ Hz, 3H), 1,50 (dq, $J = 3,0$ Hz, 7,3 Hz, 2H), 3,03 (tq, $J = 3,0$ Hz, 6,3 Hz, 1H), 3,26 (s, 3H)

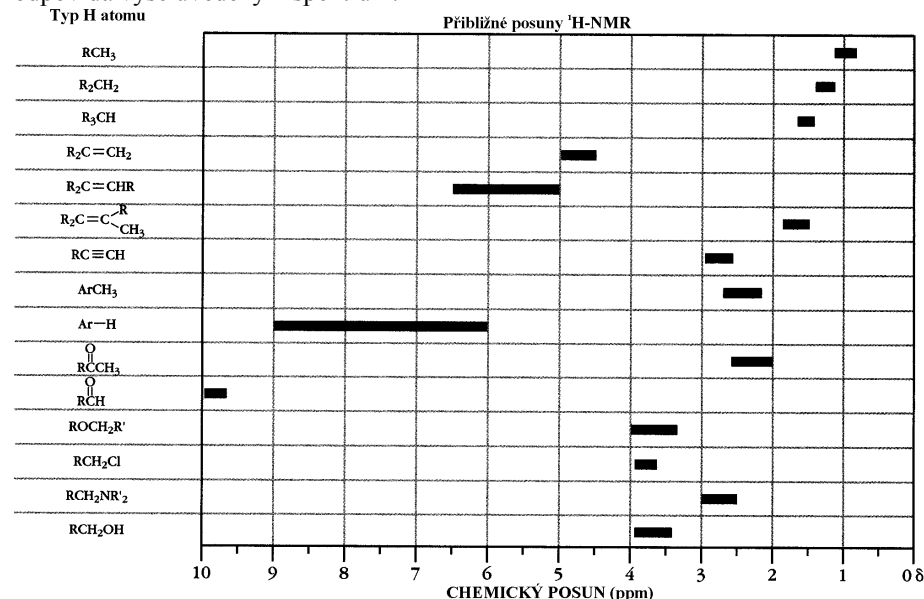
$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) 0,82 (t, $J = 6,4$ Hz, 3H), 1,35 (tq, $J = 6,4$ Hz, 6,7 Hz, 2H), 1,38 (tt, $J = 6,2$ Hz, 6,7 Hz, 2H), 3,22 (s, 3H), 3,44 (t, $J = 6,2$ Hz)

Napřed je tedy uvedeno o jaké spektrum se jedná, v závorce je frekvence přístroje a použité rozpouštědlo (v našem případě deuteriochloroform – používají se deuterovaná rozpouštědla, jejichž signál není vidět, a proto neruší interpretaci

spektra), a potom následují chemické posuny, v závorce je uveden počet linií (vysvětlení zkratk viz výše) a interakční konstanta(y) (viz níže).

Atomy vodíku vázané na heteroatomy (O, S, N) je možno ve spektrech pozorovat jen někdy a nemají pevnou oblast spektra, ve které se vyskytují. Tyto atomy vodíku neštěpí sousední atomy, tzn., že v ethanolu bude triplet o intenzitě 3 příslušející methylu, kvartet o intenzitě 2 náležící CH_2 skupině a singlet o intenzitě 1 patřící OH skupině (ten ještě nemusí být vždy vidět). Atomy vodíků od kyselin se vyskytují i v oblasti vyšší než 10 ppm, a proto je někdy nemusíme pozorovat nejen z výše uvedeného důvodu (vazba O-H).

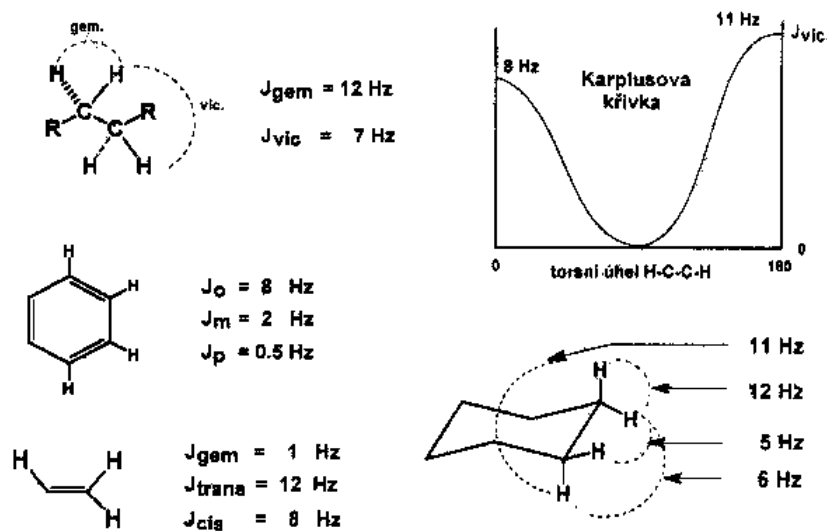
Na následujícím obrázku jsou uvedeny obvyklé chemické posuny atomů vodíků v různých skupinách. Výše tak často používanou methoxyskupinu tedy nalezneme někde od 3,2 do 4 ppm, což celkem odpovídá. Methyl se pohybuje kolem 1 ppm, CH_2 skupina pod 1,5 ppm a CH skupina nad 1,5 ppm, což také odpovídá výše uvedeným spektrům.



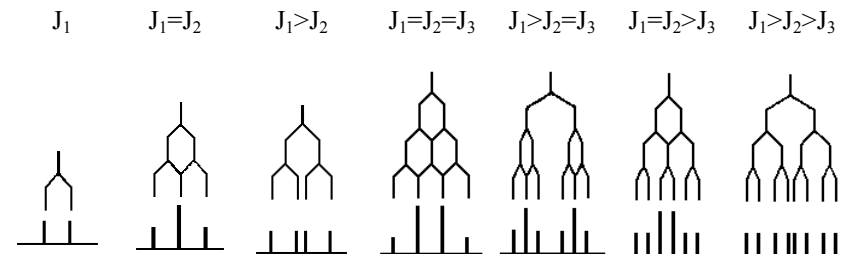
Pokud se v okolí atomů vodíků vyskytuje více funkčních skupin, které na něj mají vliv, bude signál posunut vlevo, ale nebude se jednat o prostý součet chemických posunů δ .

Interakční konstanta (J)

Mějme dva neekvivalentní vodíky, které se navzájem štěpí. Ve spektru budeme tedy pozorovat dva dublety. Vzdálenost linií dubletu v Hz nazýváme interakční konstantou ($J = \Delta\delta f$ (rozdíl maxim linií (v ppm) násobený frekvencí přístroje (v MHz))), která na rozdíl od chemického posunu nezávisí na intenzitě vnějšího magnetického pole. Například interakční konstanta pro metylové skupiny u 1-methoxy-2-methylbutanu (viz výše) je rovna 6,7 Hz (0,0223·300). Na následujících obrázcích jsou uvedeny interakční konstanty pro $^1\text{H-NMR}$ v některých funkčních skupinách. Interakční konstanty pro torsní úhel H-C-C-H můžeme také odečíst z Karplusovy křivky (srovnej s níže uvedenými interakčními konstantami pro cyklohexan).



Pokud máme například 2 ekvivalentní vodíky, štěpí každý z těchto dvou vodíků sousední vodík na dublet, ale se stejnou interakční konstantou (jedná se o ekvivalentní vodíky), což má za následek splynutí bližších linií dubletů a vytvoření tripletu, jehož prostřední linie má dvojnásobnou intenzitu oproti krajním, a proto je poměr intenzit v tripletu 1:2:1. Některé z možností štěpení jsou uvedeny níže.



Na obrázcích je tedy uveden dublet (d), triplet (t), dublet dubletu (dd), kvartet (q), dublet tripletu (dt), triplet dubletu (td) a dublet dubletu dubletu (ddd).