



Korespondenční seminář inspirovaný chemickou tematikou



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

Milí přátelé chemie a přírodních věd vůbec!

Tak se nám sešel rok s rokem a vy právě držíte v rukou poslední sérii KSICHTu v tomto ročníku. Podle vašeho očekávání v ní naleznete řešení 4. série. Pro prvních třicet řešitelů a řešitelů je připraveno soustředění na VŠCHT. Pokud mezi ně patříš, obdržel(a) jsi spolu s touto brožurou i podrobnější informace. Pečlivě si je přečti a říd' se podle nich! V případě jakýchkoliv dotazů, nápadů, připomínek ... se můžeš obrátit na ksicht@host.sk nebo na prezanka@seznam.cz.

Rádi bychom vám všem poděkovali za vaši snahu a věříme, že se s většinou z vás setkáme opět nad řešeními a že někteří z vás dokonce rozšíří řady autorů a organizátorů KSICHTu. Proto, končíš-li střední školu a máš-li zájem spolupracovat na tvorbě KSICHTu, neváhej a dej nám to vědět. Pracovní náplň organizátorů KSICHTu není jenom chemie, ale i mnoho dalších, zajímavých věcí.

Ročník 1 (2002/2003)

Série 4 – řešení

Autorské řešení úloh 4. série**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

Chtěl bych se omluvit za zadání, neboť se do něj vloudila chybka, a tak se místo tabunu objevil taurin, ale většina z vás si s tím poradila.



... a když jsem přidala česnek, tak to všechno bouchlo.
Kresba Pavel Kantorek

(0,6 + 0,5)

1	Acetanhydrid	18	Oktan	35	Limonen
2	Aceton	19	Propylbenzen	36	Lolin
3	Allen	20	Alanin	37	Lupan
4	Benzdiazohydroxid	21	Borneol	38	Lupeol
5	Benzylfluorid	22	Bruцин	39	Lysin
6	Benzylidenanilin	23	Cinchonamin	40	Methyloranž
7	Cyklobutan	24	Dulcit	41	Nerolidol
8	Cyklohexan	25	Ergometrin	42	Pinen
9	Difenylether	26	Floroglucin	43	Purin
10	Dikyan	27	Furfural	44	Sarin
11	Dodekan	28	Glycin	45	Serin
12	Dotriakontahektan	29	Hemin	46	Sylvan
13	Ester	30	Chinin	47	Tabun
14	Ethanol	31	Cholin	48	Taurin
15	Heptan	32	Indol	49	Ursan
16	Methylamin	33	Isatin		
17	Nonan	34	Korynanthein		

(10,9)

Úloha č. 2: Rum**(6 bodů)**

autor: Richard Chudoba

1. Rum je lihovina, která je vyrobena zkvašením třtinového sirupu či třtinové melasy. Lihovina vyrobená jiným způsobem nesnese označení rum. Tuzemák se vyrábí z lihu získaného z cukrové řepy nebo brambor, který je ochucen a ovoněn rumovou trestí a obarven karamellem. Jedná se o syntetickou lihovinu.

V tabulce 1 jsou shrnuty rozdíly mezi rumem a tuzemákem. Je jasné vidět, že se jedná o zcela odlišné lihoviny. Složení lihovin bylo získáno z etiket obou výrobků.

Tabulka 1. Srovnání rumu a tuzemáku

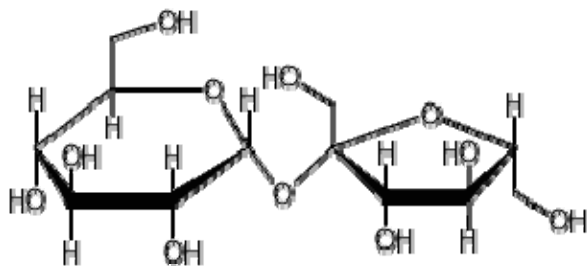
lihovina	rum	tuzemák
líh vznikne	zkvašením třtinového cukru	jiným způsobem (řepný líh)
chut' a vůni způsobují	látky obsažené v třtině a uvolněné ze sudu	cukr, rumová trest' (estery, ethylvanilin)
barvu získá	zráním v sudech	obarvením karamellem
složení	rum, třtinový cukr, voda	líh, rumová trest', cukr, karamel, vanilkové aroma

0,4 bodu za zmínku, že se tuzemák nevyrábí z třtinového cukru, a proto nemůže být rumem.

2. Návodů na rumovou trest' (esenci) je mnoho. Často je jejich součástí methylformiát, ethylformiát, isobutylpropionát a ethylvanilin.

Za uvedení alespoň jednoho z esterů 0,3 bodu.

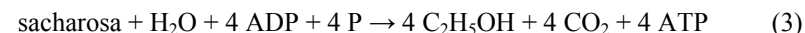
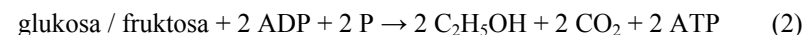
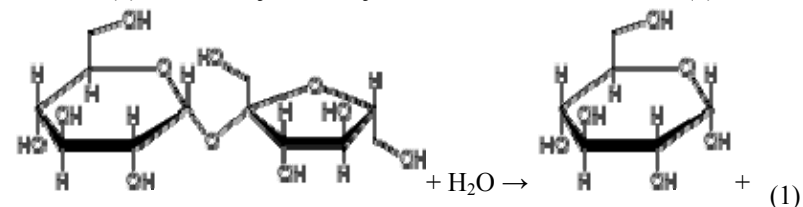
3. Třtina stejně tak jako cukrová řepa obsahuje sacharosu. Její Haworthův vzorec je uveden na obrázku 1.



Obrázek 1. Haworthův vzorec sacharosu

0,25 bodu za určení cukru, 0,5 bodu za jeho Haworthův vzorec, 0,15 bodu za odpověď na otázku týkající se cukrové řepy. Celkem 0,9 bodu.

4. Kvašení probíhá působením kvasinek *Saccharomyces cerevisiae*. Sacharosa je hydrolyzována (1) enzymem *invertasou* (β -fruktofuranosidasa), která se nachází v buněčných stěnách, na glukosu a fruktosu. Glukosa je fosforylována na glukosa-6-fosfát, jež izomerizuje na fruktosa-6-fosfát. Fruktosa je fosforylována přímo na fruktosa-6-fosfát. Biochemických cyklů se tedy účastní oba monosacharidy. Konečným produktem je ethanol a oxid uhličitý za zisku ATP (2). Vše shrnuje velmi zjednodušená sumární rovnice (3).



Jestliže probíhá kvašení za přístupu vzduchu, bude roztok kontaminován jinými mikroorganismy (zejména *Acetobacter aceti*), které přemění ethanol na kyselinu octovou (4). Nejprve vznikne acetaldehyd a z něho pak Cannizarovou reakcí kyselina octová a ethanol, který znovu podléhá oxidaci. Octové bakterie mají přísně aerobní metabolismus, takže i krátké přerušení dodávky kyslíku je v přítomnosti ethanolu usmrcuje. Kvasinky *Saccharomyces cerevisiae* získávají energii i za aerobních podmínek fermentací. Dýchací řetězec je u nich silně potlačen a k respiraci dojde až za velmi nepříznivých podmínek (nedostatek cukrů).



Přesná molekulární biologie kvasinek [http://biochemie.web.med.uni-muenchen.de/Yeast_Biology/] a jejich metabolismus [http://biochemie.web.med.uni-muenchen.de/Yeast_Biology/03_Metabolism.htm] jsou velmi komplikované.

0,3 bodu za uvedení obou monosacharidů, 0,2 bodu za rovnici hydrolyzy, 0,4 bodu za určení enzymu, 0,3 bodu za rovnici kvašení, 0,2 bodu za kyselinu octovou, 0,4 bodu příčiny a rovnice jejího vzniku. Celkem 1,8 bodu.

5. Při vyšší koncentraci ethanolu než 10 % dojde k usmrcení kvasinek. Ethanol, jakožto jejich metabolický produkt, je pro ně ve vyšších koncentracích toxický.

Předpokládejme, že máme 1 kg 25% cukerného roztoku. Roztok obsahuje 250 g sacharosy, což odpovídá 0,73 mol. Po zkvašení bude roztok obsahovat 4,0,73 mol ethanolu, přitom ale bude uvolněno 4,0,73 mol oxidu uhličitého, jehož rozpustnost v roztoku lze zanedbat. Koncentraci ethanolu pak spočítáme z definičního vztahu.

$$n(\text{sach}) = m \cdot w(\text{sach}) / M(\text{sach}) \quad (5)$$

$$w = 4 \cdot n(\text{sach}) \cdot M(\text{EtOH}) / (m - 4 \cdot n(\text{sach}) \cdot M(\text{CO}_2)) \quad (6)$$

$$w = 4 \cdot w(\text{sach}) \cdot M(\text{EtOH}) / (M(\text{sach}) - 4 \cdot w(\text{sach}) \cdot M(\text{CO}_2)) \quad (7)$$

$$w = 4 \cdot 0,25 \cdot 46 / (342 - 4 \cdot 0,25 \cdot 44) \quad (8)$$

$$w = 0,15 = 15 \% \quad (9)$$

Protože vypočtená koncentrace je vyšší než 10 %, kvašení se zastaví právě na 10% hranici a v roztoku zůstane nezakvašený cukerný podíl. Správná odpověď tedy je, že roztok obsahuje 10 % ethanolu.

0,4 bodu za zdůvodnění vzniku jen 10% roztoku, 0,4 bodu za sestavení rovnice beroucí v úvahu stechiometrii a definiční vztahy, 0,4 bodu za uvážení úbytku hmotnosti roztoku, 0,4 bodu za správně spočítanou teoretickou koncentraci, 0,4 bodu za správný výsledek. Celkem 2,0 bodu.

6. Alkohol je obsažen pouze v rumu. Jeho množství určíme z definičních vztahů pro objemový zlomek a hustotu (10).

$$m = \rho \cdot \varphi \cdot V \quad (10)$$

$$m = 0,789 \cdot 0,375 \cdot 40 \quad (11)$$

$$m = 12 \text{ g} \quad (12)$$

Ve sklenice „Beach Party“ připravené podle návodu je 12 g alkoholu (ethanolu).

Poznámka: Při takto definovaných objemových procentech platí, že $\varphi(\text{H}_2\text{O}) + \varphi(\text{EtOH}) \geq 1$. Tento jev je způsoben objemovou kontrakcí, kterou nelze u koncentrovaných roztoků lihu zanedbat. Neplatí žádný zákon zachování objemu.

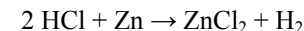
0,2 bodu za definiční vztahy, 0,4 bod za správný výsledek. Celkem 0,6 bodu.

Úloha č. 3: Kouzlo?

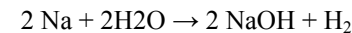
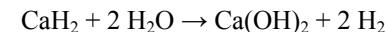
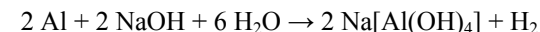
(8 bodů)

autor: Jiří Kysilka

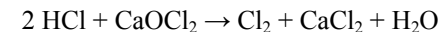
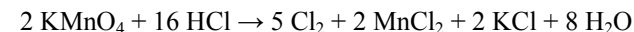
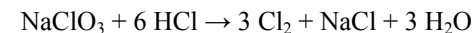
1. Plyny jsou vodík H_2 a chlor Cl_2 . Kouzelník je připravil těmito reakcemi:



Vodík lze alternativně připravit například těmito reakcemi:



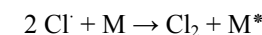
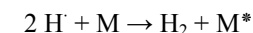
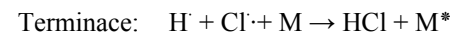
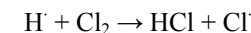
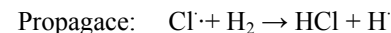
Chlor lze alternativně připravit například těmito reakcemi:



Oba plyny lze připravit elektrolýzou solanky, kdy na anodě se vylučuje chlor a na katodě vodík.

Ještě malá poznámka k významovému rozdílu slov „příprava“ a „výroba“. Příprava je snadno proveditelný laboratorní proces, při němž ze snadno dostupných a snadno uchovatelných látek získáváme látky méně snadno dostupné. Výroba je potom průmyslový proces, při němž se hledí hlavně na ekonomické aspekty a mnohdy k němu jsou potřeba speciální zařízení. Proto nelze za přípravu považovat prohánění vodní páry nad rozžhaveným železem, termický rozklad methanu či zavádění plynného fluoru do roztoku chloridů. Dovedete si představit, jak tyto reakce provádíte v laboratoři? V KSICHTu tyto věci uznáváme, ale jistě se časem setkáte s lidmi, kteří toto tolerovat nebudou. (1,5 b)

2. Celková reakce: $\text{H}_2 + \text{Cl}_2 \rightarrow 2 \text{HCl}$



M je další molekula, jejímž úkolem je absorbovat část energie, uvolněné vznikem vazby. Při vzniku vazby srážkou dvou radikálů je totiž energie takto

vzniklé molekuly větší, než je energie potřebná k zpětnému rozštěpení vazby, nebýt třetí molekuly, vzniklá vazba by se opět během krátkého časového okamžiku rozštěpila. Roli třetí molekuly může hrát i stěna válce. (1,5 b)

3. Foton světla, které je schopné iniciovat reakci chloru s vodíkem, musí mít energii větší nebo rovnu energii vazby chlor-chlor. Energie vazby vodík-vodík je příliš vysoká a vlnovou délku iniciačního světla neovlivňuje.

Energii jedné vazby chlor-chlor spočteme takto:

$$E_i = \frac{E_{C-Cl}}{N_A} = \frac{243000}{6,022 \cdot 10^{23}} = 4,035 \cdot 10^{-19} \text{ J.molekula}^{-1},$$

maximální vlnovou délku světla, schopného iniciovat reakci, potom takto:

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E_i} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 299792458}{4,035 \cdot 10^{-19}} = 492,3 \text{ nm}$$

Reakci iniciuje světlo s vlnovou délkou 492,3 nm a nižší, čemuž vyhovuje modré světlo, ale červené světlo ne.

4. Při reakci 1 mol vodíku s 1 molem chloru se uvolní teplo Q:

$$Q = 2 \cdot E(H-Cl) - E(H-H) - E(Cl-Cl) = 184 \text{ kJ}.$$

Vzhledem k tomu, že se jedná o adiabatický děj, tak se veškeré teplo spotřebuje na ohřátí vzniklých 2 molů chlorovodíku o teplotu ΔT . Jelikož reakce probíhá za konstantního objemu a chlorovodík je dvouatomovým plynem, tak platí:

$$\Delta T = \frac{Q}{n \cdot c_V} = \frac{Q}{2 \cdot \frac{5}{2} \cdot R} = \frac{184000}{5,8,314} = 4426,3 \text{ K}$$

Předpokládáme-li, že před reakcí měl plyn laboratorní teplotu 298 K a že chlorovodík se chová ideálně, pak pro izochorický děj, při němž se látkové množství nemění, platí:

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{T_2}{T_1} = \frac{T_1 + \Delta T}{T_1} = 15,85$$

Po reakci je tedy ve válci 15,85krát vyšší tlak, než před reakcí, tj. vzhledem k tomu, že válec byl plněn za atmosférického tlaku 101 325 Pa, je ve válci tlak asi 1,61 MPa.

Izotermické provedení výše uvedeného děje by se muselo zařídit pomalým provedením reakce a neustálým chlazením reakční směsi, bylo by totiž nutno veškeré vzniklé teplo odvést do okolí. Vzhledem k tomu, že při reakci se nemění

objem ani teplota a látkové množství je též konstantní, byl by konstantní i tlak a tudíž není důvod očekávat explozi.

5. Odpověď na poslední otázku nalezneme v tabulce disociačních energií vazeb. Vazba C-F má disociační energii větší než vazba C-C, což znamená, že při vzniku vazby C-F se uvolní takové množství energie, které může rozštěpit vazbu C-C a tím zborit uhlíkatý řetězec. Neděje se tak vždy, neboť energie se může rozptýlit po celé molekule, ale při nevhodném provedení reakce se tak děje až příliš často a my bychom místo kýženého produktu získali směs fluorovodíku a sazí.

Úloha č. 4: Zápisky cestovatele aneb úloha termodynamická

(12 bodů)

autor: Ondřej Kaman

1. Teplotu varu vody ve výšce 6500 m n. m. (T_2) lze určit s pomocí Clausiovy-Clapeyronovy rovnice, známe-li atmosférický tlak v dané poloze (p_2), neboť kapalina začne vřít, když se tlak nasycených par vyrovná vnějšímu, a máme-li referenční dvojici hodnot: tlak nasycených par (p_1) kapaliny a odpovídající teplotu (T_1). Jejich znalost vyplývá ze skutečnosti, že voda za standardního tlaku $p^0 = 101\,325 \text{ Pa}$ (p_1) vře při 100 °C ($T_1 = 373,15 \text{ K}$). Tlak p_2 nalezneme prostřednictvím barometrické rovnice odvozené za předpokladu neměnnosti teploty, proto hustotu vzduchu při hladině moře, potřebnou k výpočtu, určíme pro teplotu $T = 263,15 \text{ K}$.

Vzduch v aproximaci ideálního plynu (Vážený čtenáři, proč je toto přiblížení oprávněné?) se chová dle populární rovnice ideálního plynu: $pV = nRT$. Zde řešíme první dilema: látkové množství lze totiž psát jako $\sum_{\text{vzduch}} n_i$ nebo též vyjádřit

jako podíl m / \overline{M}_m , kde \overline{M}_m jsme označili průměrnou molární hmotnost vzduchu, jež si zavedeme vztahem $\sum_{\text{vzduch}} x_i M_{m,i}$ (x značí molární zlomek), ta

nabývá významu hmotnosti jednoho molu vzduchu. Molární zlomek jednotlivého plynu ve směsi ideálních plynů je samozřejmě roven objemovému zlomku (důkaz provedete prostřednictvím definice těchto zlomků a stavové rovnice ideálního plynu).

Obě možnosti vedou ke správnému řešení (provedte důkaz jejich ekvivalence), my se ovšem vydáme cestou druhou, poněkud elegantnější. Pak podle definice měrné hustoty a z výše uvedeného, že

$$\rho = m/V = p \overline{M}_m / (RT).$$

Získáme dosazením do barometrické rovnice tlak ve výšce h:

$$p_2 = p^0 \exp\left(-gh \sum_{\text{plyny}} x_i M_{m,i} / (RT_2)\right)$$

Jednoduchou algebraickou úpravou z Clausiovy-Clapeyronovy rovnice a následným dosazením:

$$T_2 = \left(\frac{1}{T_1} - \ln\left(\frac{p_2}{p_1}\right) \cdot \frac{R}{\Delta H_{\text{vyp}}(\text{H}_2\text{O})}\right)^{-1} = \left(\frac{1}{T_1} - \ln\left(\frac{p^0}{p^0} \exp\left(-gh \sum_{\text{vzduch}} x_i M_{m,i} / (RT)\right)\right) \cdot \frac{R}{\Delta H_{\text{vyp}}(\text{H}_2\text{O})}\right)^{-1} = \left(\frac{1}{T_1} + \frac{gh \sum_{\text{vzduch}} x_i M_{m,i}}{\Delta H_{\text{vyp}}(\text{H}_2\text{O}) \cdot T}\right)^{-1}$$

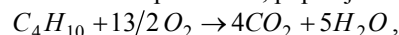
Číselně: $T_2 = 350,6 \text{ K}$, tj. $77,4 \text{ }^\circ\text{C}$.

2. Během přípravy kávy zahříváme vodu k varu. Nejdříve led vyměňuje s okolím entalpii potřebnou k ohřátí z $-10 \text{ }^\circ\text{C}$ na $0 \text{ }^\circ\text{C}$, dále tající led entalpii skupenského přechodu (tání) a konečně voda entalpii spojenou s ohřátím na teplotu T_2 . Formalizujeme-li matematicky tuto úvahu s použitím dostupných konstant, dostaneme pro entalpii celého děje:

$$\Delta H = c_p(\text{H}_2\text{O}(s)) \cdot m(\text{H}_2\text{O}) \cdot 10\text{K} + \Delta h_{\text{tání}}(\text{H}_2\text{O}) \cdot m(\text{H}_2\text{O}) + C_p(\text{H}_2\text{O}(l)) \cdot m(\text{H}_2\text{O}) / M_m(\text{H}_2\text{O}) \cdot (T_2 - 273,15\text{K})$$

Pro názornost uvádíme mezivýpočet: $\Delta H = 112 \text{ kJ}$.

Standardní spalnou molární entalpii butanu, popisující reakci



zjistíme s uvážením faktu, že entalpie představuje stavovou veličinu:

$$\Delta H_{sp}^0(\text{C}_4\text{H}_{10}) = 4\Delta H_f^0(\text{CO}_2) + 5\Delta H_f^0(\text{H}_2\text{O}(l)) - \Delta H_f^0(\text{C}_4\text{H}_{10}),$$

kde si musíme uvědomit definitorickou rovnost nule standardní slučovací entalpie čistých prvků ve standardním stavu a nejstabilnější formě.

Přistoupíme k bilanci vlastního zahřívání, které probíhá s účinností η :

$$\Delta H = -\eta \left(n(P) \cdot \Delta H_{sp}^0(P) + n(B) \cdot \Delta H_{sp}^0(B) \right)$$

s označením propanu P a butanu B. Vyjádříme-li látková množství jako

$n_i = mw_i / M_{m,i}$, lze přepsat vztah na

$$m = -\Delta H / \left(\eta \left(w(P) / M_m(P) \cdot \Delta H_{sp}^0(P) + w(B) / M_m(B) \cdot \Delta H_{sp}^0(B) \right) \right).$$

Odkud vypočítáme hmotnost topné směsi potřebnou k přípravě jednoho šálku kávy: $m = 3,44\text{g}$.

Při přípravě osmi šálků kávy denně by bomba vydržela

$$t = [250\text{g}/m] \text{ dní},$$

kde [x] symbolizuje neelementární funkci celá část x. Číselně: $t = 9 \text{ dní}$.

Káva však vydrží jen $t = [250\text{g}/(8 \cdot 7,5\text{g})] \text{ dní} = 4 \text{ dny}$.

3. Do trysky v hořáku vařiče vstupuje $\approx 4,6 \cdot 10^6$ molekul/s. To znamená vstup určitého látkového množství, pro které platí: $\approx 4,6 \cdot 10^6 / N_A \cdot s^{-1}$, kde N_A značí Avogadrovu konstantu. Tomu dále odpovídá jistá hmotnost směsi propanu a butanu, která každou sekundu proudí do hořáku: $m/t \approx \overline{M}_m \cdot 4,6 \cdot 10^6 / N_A \cdot s^{-1}$, \overline{M}_m jsme označili průměrnou molární hmotnost palivové směsi (*vide infra*). Zde dlužno podotknout, že molární zlomek jednotlivé látky ve směsi můžeme nalézt následující

$$\text{úvahou: } x_i = \frac{w_i / M_{m,i}}{\sum_{\text{směs}} w_j / M_{m,j}}$$

Dobu potřebnou k dosažení varu pak získáme podílem m a m/t.

Číselně: $t \approx 1,5 \text{ min}$. Pro obvyklé dva šálky kávy je zapotřebí doby dvojnásobné.

4. Výpočet se omezuje na vyčíslení entalpie spojené s ohřátím vody z $10 \text{ }^\circ\text{C}$ na $100 \text{ }^\circ\text{C}$, kdy dochází k varu za standardního tlaku, poněvadž tuto entalpii spotřeba propan-butanu odráží jen přes konstantu úměrnosti.

$$\Delta H(\text{zde}) = C_p(\text{H}_2\text{O}(l)) \cdot m(\text{H}_2\text{O}) / M_m(\text{H}_2\text{O}) \cdot 90\text{K}$$

$$\Delta H(\text{zde}) = 62,1 \text{ kJ}$$

Procenticky spotřeba topného plynu u nás tvoří **55,5 %** spotřeby ve výšce 6500 m n. m. a obráceně spotřeba v této výšce **180 %** spotřeby u nás. Je třeba si uvědomit, že při ohřívání ledu k $0 \text{ }^\circ\text{C}$ se dodává relativně málo tepla, zatímco během tání je nutno ho vložit značné množství na rozrušení vodíkových vazeb, oproti kterému představuje ohřívání kapaliny již proces méně tepelně náročný, avšak na rozdíl od ledu je tepelná kapacita kapalné vody zhruba dvojnásobná. Při zahřívání vody o teplotě $10 \text{ }^\circ\text{C}$ na normální teplotu varu $100 \text{ }^\circ\text{C}$ stačí realizovat jen poslední zmíněný proces, který i přes teplotní změnu řádově o 13 K větší vede k jen lehce nadpoloviční spotřebě spotřeby prvé.

Úloha č. 5: Neznámá látka

(10 bodů)

autor: Pavel Řezanka

Začneme se sloučeninou 1 s jejím hmotnostním spektrem. $[M+2]^+$ ion má třetinovou intenzitu vůči molekulovému iontu, což znamená přítomnost jednoho atomu chloru.

V IR spektru můžeme vidět karbonylovou nebo karboxylovou skupinu pod 1800 cm^{-1} a přítomnost hydroxylové skupiny okolo 3600 cm^{-1} . Z těchto údajů můžeme usoudit na přítomnost dvou atomů kyslíku.

Molekulová hmotnost bez atomu chloru a atomů kyslíku je $(182 - 35 - 32) / 12 = 9$. Toto číslo vydělíme 12 (molekulová hmotnost uhlíku) a po zaokrouhlení dostaneme $9 \cdot 12 = 108$, tzn. že atomů vodíku je $(115 - 108) / 1 = 7$. Sumární vzorec látky 1 je tedy $\text{C}_9\text{H}_7\text{O}_2\text{Cl}$.

Z MS spektra můžeme ještě usoudit na přítomnost aromatického kruhu z iontu o $m/z = 91$.

V $^1\text{H-NMR}$ spektru vidíme signály od pouze 6 atomů vodíku, ale to nevadí, neboť nemusíme vidět všechny (viz seriál o NMR). To odpovídá IR spektru. Dva dublety u 7,4 ppm a 8,0 ppm indikují přítomnost para-substituovaného benzenu, což souhlasí s MS spektrem. Další dublety indikují přítomnost dvojně vazby, která je trans: $J = \Delta\text{ppm} \cdot f = 0,04 \cdot 300 = 12\text{ Hz}$, což ji odpovídá (viz seriál o NMR).

Máme tedy tyto fragmenty: Cl-, -Ph-, -CH=CH-, -COOH, což nám umožňuje sestavit dvě možné struktury: Cl-Ph-CH=CH-COOH a Cl-CH=CH-Ph-COOH. Zde je čas použít nápovědu. Při reakci s první z výše uvedených možných látek s KIO_4 dochází ke štěpení dvojně vazby, ale atom chloru zůstává na fenylu, což je molekula s větší molekulovou hmotností (viz nápověda). Při reakci KIO_4 s druhou látkou zůstává chlor na molekule s menší molekulovou hmotností, což neodpovídá zadání.

Látka č. 1 je tedy Cl-Ph-CH=CH-COOH, dvojná vazba je trans. Tato sloučenina nemá chirální centrum.

Název: kyselina 3-(*p*-chlorfenyl)-*E*-propenová

A nyní látka č. 2. Z IR spektra můžeme usoudit na přítomnost hydroxylové skupiny. Z MS spektra určíme sumární vzorec: $88 - 16$ (atom kyslíku) = 72. $72:12$ (atom uhlíku) = 6, což ovšem neodpovídá, neboť by molekula měla sumární vzorec C_6O . Atomů uhlíku je tedy $5 \cdot 12 = 60$, atomů vodíku je tedy $(72 - 60) / 1 = 12$. Sumární vzorec je tedy $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$, což znamená, že látka není cyklická a neobsahuje násobné vazby (uhlovodík C_5H_{12} je alkan).

V $^1\text{H-NMR}$ spektru snadno nalezneme tři dublety reprezentující tři methylové skupiny. Jeden atom vodíku, který ve spektru chybí, patří hydroxylové skupině.

Z celkového počtu signálů (5) můžeme usoudit, že na každý atom uhlíku je vázán alespoň jeden atom vodíku. Máme tedy tyto fragmenty: -CH₃, -CH₃, -CH₃, -CH-, -CH-, -OH. Sloučenina 2 je tedy $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{OH})\text{CH}_3$.

Její název je 3-methylbutan-2-ol a má jeden chirální atom uhlíku. O jaký enantiomer se jedná se dá zjistit například změřením optické otáčivosti a porovnáním se standardy.

Výchozí sloučenina vznikla hydrolýzou, což nás při pohledu na sloučeniny 1 a 2 přivádí na myšlenku, že původní sloučenina byla ester. Výchozí látka je tedy

Cl-Ph-C=C-COO-(CH₃)CHCH(CH₃)₂.

Název: 3-methylbutylester kyseliny 3-(*p*-chlorfenyl)-*E*-propenové