

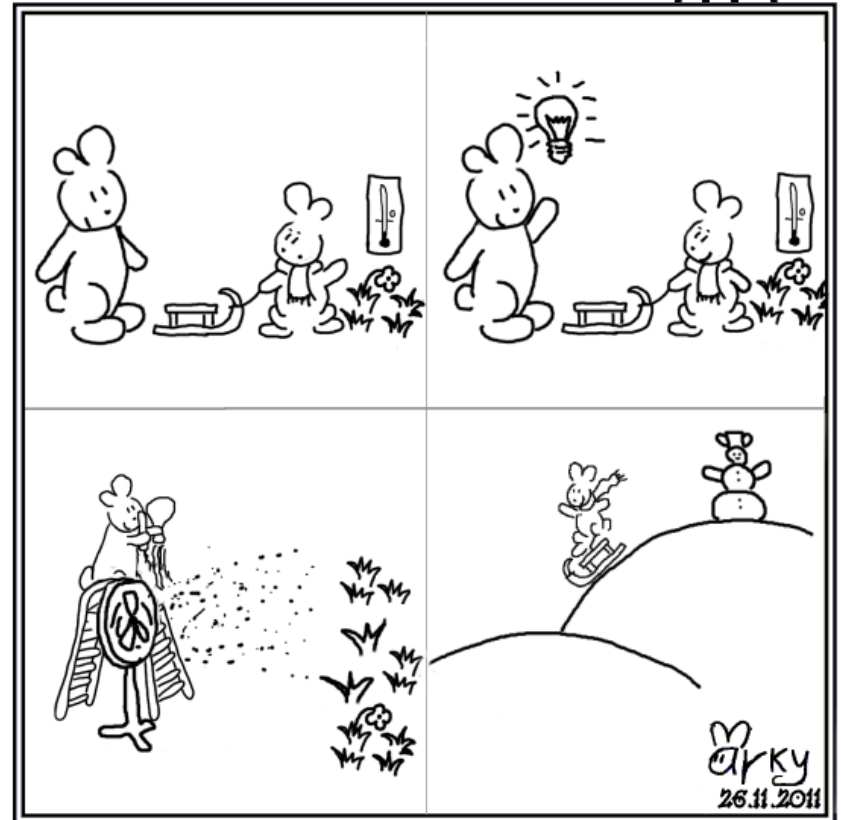


Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 10 (2011/2012)

Série 2

Zajíček chemik



Integrační krok musí být kratší než nejkratší pohyb v systému, což bývá pohyb nejjednodušších prvků – typicky vodíků. Běžně se proto používají integrační kroky v řádech femtosekund (10^{-15} s). Bohužel to nás značně omezuje v tom, jak dlouhé časové škály můžeme simulovat. Většina relevantních jevů pro chemii našeho světa se ale děje v řádech sekund až hodin, takže abychom nějaký takový děj popsali, museli bychom nasimulovat 1 000 000 000 000 000 integračních kroků a to je při řádově tisících atomech v systému na současných počítačích jednak „neupočitatelné“⁹ a také „neuložitelné“¹⁰. Simulujeme tedy jen to, co je možné (dnes řádově stovky nanosekund), a ukládáme pozice jen po určité době (např. v řádech desítek pikosekund).

Molekulárně dynamické simulace nám i tak pomáhají pochopit, jak se atomární systém chová v čase, a díky detailnímu pohledu pomáhají vysvětlit experimentální zjištění.

Závěrem

V tomto dílu seriálu jsme se zaměřili na metody molekulárního modelování, které pracují s jednotlivými atomy, ať už jde o molekulární mechaniku, či dynamiku. Obě metody se dnes masově používají, protože popsané rovnice jsou velice jednoduché. S pomocí molekulární grafiky napomáhají mnoho experimentů pochopit a současně i navrhnout experimenty nové. V příštím dílu se naopak zaměříme na chování elektronů a pomocí kvantové chemie zvládneme modelovat i vznik vazeb, a tedy i chemické reakce.

Literatura

Manuál simulačního balíku GROMACS – www.gromacs.org

Abyste viděli rozdíl mezi optimalizací struktury molekulární mechaniky a molekulární dynamikou, připravili jsme pro vás videa nasimulovaná těmito technikami s panáčkem z obrázku 1. Videa naleznete jak na stránkách KSICHTu – www.ksicht.natur.cuni.cz, tak na našem YouTube kanálu.

⁹ Např. pro simulaci s 24 000 atomy jsme schopni spočítat v roce 2011 „pouze“ cca 43 ns/den na stroji AMD Opteron 6168 1,9 GHz s 48 CPU jádry.

¹⁰ Pro uložení 24 000 atomů potřebujeme pro každý uložený snímek z trajektorie alespoň 3 byty na jeden atom (3 souřadnice), tedy jeden snímek by zabíral v paměti 72 kB. Pokud bychom chtěli uložit trajektorii pro jeden den v každém integračním kroku po 2 fs, tak musíme uložit cca $1,6 \cdot 10^{12}$ B tedy 1,45 TB a trajektorie pro 1 ms simulaci by zabírala $3,6 \cdot 10^{16}$ B tedy 3,2 PB, což je zhruba desetina diskové kapacity uložené na serverech Facebooku v březnu 2011 (viz. Moving an Elephant: Large Scale Hadoop Data Migration at Facebook - http://www.facebook.com/note.php?note_id=10150246275318920).



Korespondenční seminář
probíhá pod záštitou
Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy
Hlavova 2030
128 43 Praha 2

Milí příznivci chemie i ostatních přírodovědných oborů!

Právě držíte v rukou zadání úloh Korespondenčního Semináře Inspirovaného Chemickou Tematikou, KSICHTu. Už desátým rokem pro vás, středoškoláky, KSICHT připravují zaměstnanci a studenti Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy, Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity a Univerzity Palackého v Olomouci.

Jak KSICHT probíhá?

Korespondenční seminář je soutěž, při níž si vy, řešitelé KSICHTu, dopisujete s námi, autory, a naopak. Vy nám pošlete řešení zadaných úloh, my vše opravíme, ohodnotíme a zašleme vám je zpátky s příloženým autorským řešením a pěti úlohami nové série. To všechno se za celý školní rok čtyřikrát zopakuje.

Proč řešit KSICHT?

V rámci tohoto semináře se zdokonalíte nejen v chemii samotné, ale i v mnoha dalších užitečných schopnostech. Za všechny jmenujme zlepšení logického myšlení, schopnosti vyhledávat informace, třídít je a zařazovat je do kontextu. Ačkoli to zní možná hrozivě, nebojte, ono to půjde vlastně samo.

Na výletech se můžete seznámit s dalšími řešiteli KSICHTu a námi, autory, studenty vysokých škol. Máte šanci rozšířit si své obzory, ale taky se bavit a užít si. Uvidíte, že chemici nejsou suchaři v bílých pláštích.

Na konci školního roku pořádáme na Přírodovědecké fakultě UK odborné soustředění, kde si vyzkoušíte práci v laboratoři, seznámíte se s moderními přístroji a poslechnete si zajímavé přednášky. Pro nejlepší řešitele jsou připraveny hodnotné ceny!

Pro letošní akademický rok se nám navíc podařilo zajistit **promíjení přijímacích zkoušek** do chemických (a některých dalších) studijních oborů **na Přírodovědecké fakultě UK**. Bez přijímací zkoušky budou přijati řešitelé, kteří ve školním roce 2010/2011 získali alespoň 50 % z celkového počtu bodů nebo ve školním roce 2011/2012 v 1.-3. sérii získají alespoň 50 % z celkového počtu bodů za tyto série.

Jaké úlohy na vás čekají?

Úlohy se týkají různých odvětví chemie a snažíme se, aby si v nich každý z vás přišel na své. Jsou tu úlohy hravé i pravé lahůdky, jejichž vyřešení už dá práci. Nechceme jen suše prověřovat vaše znalosti, procvičíte si i chemickou logiku a v experimentální úloze prokážete též svou chemickou zručnost. Pokud nevládnete vyřešit všechny úlohy, vůbec to nevadí, byli bychom moc rádi, kdybyste si z řešení úloh odnesli nejen poučení, ale hlavně abyste se při řešení KSICHTu dobře bavili. Jak se nám naše snažení daří, to už musíte posoudit sami.

KSICHT vám přináší s každou sérií i seriál, čtení na pokračování. V letošním ročníku zařazujeme na vaše přání seriál Úvod do výpočetní chemie. Dozvíte se spoustu zajímavých informací, které vám umožní přemýšlet o světě kolem sebe trochu jinak. Znalosti, které získáte, pak můžete použít nejen při řešení úloh KSICHTu, ale i při dalším studiu chemie.

Jak se tedy můžete stát řešiteli KSICHTu?

Není nic jednoduššího! Stačí se jen zaregistrovat¹ na našich webových stránkách. Řešení nám poté můžete posílat buď klasicky na adresu KSICHT, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2 nebo elektronicky přes webový formulář² jako soubory typu PDF.

V případě jakýchkoliv dotazů či nejasností se na nás prosím kdykoliv obraťte e-mailem ksicht@natur.cuni.cz.

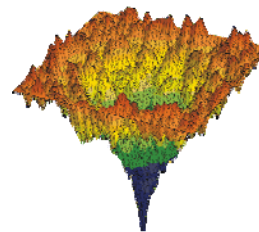
Každou úlohu vypracujte na zvláštní papír (aspoň formátu A5, menší kusy papíru mají totiž tendenci se ztrácet), uveďte svoje celé jméno, název a číslo úlohy! Řešení pište čitelně, vězte, že nemůžeme považovat za správné něco, co nelze přečíst.

V případě, že posíláte úlohy přes webový formulář, uložte každou úlohu do samostatného souboru typu PDF a nezapomeňte v záhlaví každé stránky uvést svoje celé jméno, název a číslo úlohy! Více informací o elektronickém odesílání řešení naleznete přímo na stránce s formulářem. Neposílejte nám prosím naskenovaná řešení, neboť jsou často velice špatně čitelná. Výjimkou jsou nakreslené a naskenované obrázky, které připojíte k řešení napsanému na počítači.

Do řešení také pište všechny vaše postupy, kterými jste dospěli k výsledku, neboť i ty budujeme. Uveďte raději více než méně, protože se může stát, že za strohou odpověď nemůžeme dát téměř žádné body, ačkoli je správná. Řešení

¹ <http://ksicht.natur.cuni.cz/prihlaska>

² <http://ksicht.natur.cuni.cz/odeslani-reseni>



Obrázek 6 – povrch potenciální energie (PES) v případě skládání proteinů, tzv. protein funnel. Na PES existuje mnoho lokálních minim, ale pouze jedno globální, kterému odpovídá jeho funkční struktura.

Naneštěstí v průběhu optimalizace můžeme uvíznout i v lokálních minimech. K tomu, abychom neoptimalizovali jen do lokálního minima, musíme mít nějaký nástroj, jak překonat jednotlivé bariéry mezi minimy a tzv. „projít fázový prostor“. Jedním z takových nástrojů je molekulární dynamika.

Molekulární dynamika

Zatímco molekulární mechanika pracuje pouze s potenciální energií, molekulární dynamika přidává i kinetickou energii, která se počítá z rychlostí jednotlivých atomů či molekul. Díky kinetické energii můžeme překonávat bariéry na povrchu potenciální energie. Molekuly se v molekulární dynamice rozpohybují a my následně simulujeme skutečný pohyb atomů v systému, což má velké množství aplikací, když se snažíme pochopit, jak věci fungují a jaké mají fyzikální vlastnosti.

Molekulárně dynamická simulace začíná tím, že si z pozic atomů vypočítáme jejich potenciální energii a určíme, jaká síla působí na ten který atom. Navíc každému atomu přidělíme náhodnou rychlost tak, aby distribuce rychlostí odpovídala Maxwell-Boltzmanovu rozdělení pro teplotu, při které hodláme simulovat náš systém.

Poté předpokládáme, že pro určitý velmi krátký čas, tzv. integrační krok, jsou síly a rychlosti konstantní a počítáme, jak se změni rychlosti atomů působením sil dle rovnice (5), a kam se atomy posunou dle rovnice (6). Následně musíme znovu spočítat, jak se změnila síly působící na každý atom a provedeme další krok, tedy znovu upravíme rychlosti dle nových sil a opět posuneme atomy a zaznamenáváme jejich pozice v čase do tzv. trajektorie.

$$v_x(t + \Delta t) = v_x(t) + a_x(t) \cdot \Delta t \quad (5)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v_x(t) \cdot \Delta t + a_x(t) \cdot \Delta t^2 \quad (6)$$

kde $x(t)$ je původní poloha v čase t , $v_x(t)$ a $a_x(t)$ jsou rychlosti a zrychlení (dané působením síly) v čase t , a $x(t + \Delta t)$ a $v_x(t + \Delta t)$ je nová poloha a rychlost po integračním kroku o délce Δt .

Potenciály dihedrálních úhlů jsou jednou z hlavních složek rozhodujících o stabilitě jednotlivých konformací, ale bohužel se většinou nejobtížněji parametrizují, neboť se do jejich průběhu promítají i všechny ostatní potenciály, jako například repulze (o níž již byla řeč) či nevazebné interakce.

Nevazebné interakce

O nevazebných interakcích už byla řeč minule, jde především o elektrostatické interakce. V případě molekulárního modelování se často tento typ interakcí zjednodušuje do dvou interakcí. Jednak jde o přímou interakci (nefyzikálních) parciálních nábojů, které přiřazujeme jednotlivým atomům, abychom popsali jejich fyzikální chování, např. elektrostatický potenciál. A jednak zahrnujeme i disperzní interakce, které vyplývají z okamžité fluktuace elektronů a přitahují atomy k sobě.

Pro zjednodušení výpočtu se disperze často kombinuje s repulzí (o níž byla už řeč u vazeb, ale která samozřejmě funguje i mezi atomy, které nejsou spojeny vazbou). Používá se tzv. Lennard-Jonesův potenciál, který svým průběhem připomíná vazebnou křivku z obrázku 2, ale její energetické minimum je řádově slabší. Přes tuto zdánlivou slabost disperzních interakcí je jejich hlavní silou množství a spolupodílejí se na soudržnosti molekul v kapalinách a dokonce udržují na skle gekona, jak je vidět na následujícím obrázku.



Obrázek 5 – Gekon na skle drží pomocí velmi jemných keratinových chloupků (má jich na každé pacičce asi 500 000), které mají dohromady obrovský povrch.

Jednotlivé chloupky drží na skle pomocí van der Waalsových interakcí (další označení disperzních sil)

Keller et al. *Nature* (2000) **405**, 681-685

Mix vazebných a nevazebných interakcí popisující potenciální energii molekuly umožňuje rozlišovat, jak moc je dotyčná molekula stabilní, podobně jako jsme si to uvedli v případě konformací butanu.

Navíc můžeme vypočítat i síly, které na jednotlivé atomy působí. Posunem atomů podél sil můžeme zmenšovat potenciální energii molekuly tak dlouho, až budeme mít molekulu v optimální konformaci. Problém je v tom, že jednotlivé síly jdou často proti sobě, a tak se vztah mezi pozicemi atomů a energií dost zašmodrchává. Výsledkem pak je zvrásněný povrch potenciální energie, na kterém hledáme globální minimum (viz obrázek 6).

vypracovávejte samostatně, neboť při společném řešení se spoluřešitelé podělí o získané body rovným dílem.

Tipy a triky

Pro kreslení chemických vzorců doporučujeme používat programy dostupné zdarma: Accelrys Draw 4.0 (freeware s povinnou registrací; Windows), ChemSketch 12.0 Freeware (freeware s povinnou registrací; Windows, Linux) a Chemtool (GPL; Linux).

KSICHT na Internetu

Na webových stránkách KSICHTu³ naleznete brožurku ve formátu PDF a rovněž aktuální informace o připravovaných akcích.

Pokud máte dotaz k úloze, můžete se zeptat přímo autora na e-mailové adrese ve tvaru jmeno.prijmeni@ksicht.natur.cuni.cz. Jestliže má úloha více autorů, pište prvním uvedenému.

Den otevřených dveří na PŘF UK

V pátek 20. ledna 2011 se na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy v Praze uskuteční den otevřených dveří. Dozvíte se informace o studiu na fakultě, budete si moci prohlédnout laboratoře a dozvědět se aktuální novinky ve výzkumu. Srdečně vás zveme! Více informací naleznete na webových stránkách PŘF UK.⁴

Errata

V první sérii byl u zadání třetí úlohy chybně uveden celkový počet bodů. Úloha však byla hodnocena 9 body, nikoli 10.

Termín odeslání 2. série

Série bude ukončena 2. ledna 2012. Vyřešené úlohy je třeba odeslat nejpozději v tento den (rozhoduje datum poštovního razítka, či čas na serveru KSICHTu).

³ <http://ksicht.natur.cuni.cz>

⁴ <http://www.natur.cuni.cz/faculty/studium/studium-bc/>

Úvodník

Drahé ksichťačky, draží ksichťači,

dovolte mi začít tento úvodník poněkud osobní otázkou. Přemýšleli jste někdy o chutích? Tedy kolik rozdílných chutí lidé během jednoho dne stihnou mít. Někdy mi připadá, že celá naše společnost je na chutnání či chtění vlastně založena. Hned ráno vše začíná chutí si přidat ještě alespoň 3 minutky spánku v teplé posteli. Poté rychle sníst chutný jogurt s příchutí lesního ovoce, zapít ho čajem ochuceným citronovou šťávou a chtě nechtě vyrazit. Denní tisk je však radno nechat až do MHD. Většina zpráv totiž zanechává po přečtení nepříjemnou pachut'. Hodiny ve škole pak často ubíhají až nechutně pomalu. Obzvláště, pokud některým předmětům nemůžete přijít na chuť. O to více si však můžete vychutnat osvobozující zvonění a volno po zbytek dne. Co víc chtít? Chutí je mnoho. Ve zbytku tohoto textu bych se však s vašim dovolením rád zabýval jednou z nejušlechtilějších: Chutí řešit nové úlohy KSICHTu. Pokud ji občas také míváte, mám pro vás velmi dobrou zprávu. Nyní ji totiž můžete opět naplno uspokojit. Přichystali jsme pro vás pět nových úloh, které čekají jen a pouze na vaše vyřešení. A začínáme velmi kreativně. První úloha totiž dokonale provětrá nejen vaše znalosti chemie, ale i angličtiny, geometrie a zacházení s nůžkami a lepidlem. Ve druhé si budete muset doslova posvítit na Graetzelův solární článek, abyste zjistili, jak celá ta šikovná věčička funguje. Třetí v pořadí je úlitba bohům organické chemie – stará dobrá mnohastupňová syntéza. Pokud vás však divoké víření molekul unavilo, můžete v předposlední úložce věnovat krátkou vzpomínku minulé sérii a spolu s analytickými hobity načerpat chybějící energii během návštěvy Středozemě. Pokud byste však spíše než na analytickou chemii byli orientováni na použití sofistikovaných inženýrských metod k topení králíků, úloha poslední je dělaná přímo pro vás.

Co závěrem? Snad kdybyste přeci jen měli po tom všem chuť ještě na chemický přídavek, mohu vřele doporučit 20. ledna návštěvu Dne otevřených dveří na PřF UK. Vaší pozornosti by také neměl uniknout nový web pro přírodovědné nadšence www.prirodovedci.cz.

Přeji hodně štěstí při řešení a na shledanou zase v příští sérii.

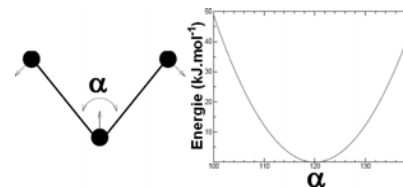
Honza Havlík

Vzhledem k tomu, že při molekulárním modelování většinou neuvažujeme disociaci vazeb a naopak se snažíme výpočet co nejvíc zjednodušit, používá se často aproximace harmonickým potenciálem (viz rovnice (3)), nebo dokonce délku vazeb považujeme za konstantní.

$$E_{\text{vazby}} = \frac{1}{2} k_{\text{vazby}} (r_{ij} - r_{ij}^{\text{eq}})^2 \quad (3)$$

Úhly

Podobně jako vazby se chovají i úhly svírané dvěma vazbami mezi trojicí atomů. Také preferují rovnovážný úhel a změna je možná pouze při dodání dostatečné energie (viz obrázek 3). Je vhodné dodat, že silové konstanty pro úhlový potenciál v rovnici (4) bývají o řád menší než v případě silových konstant vazby v rovnici (3).

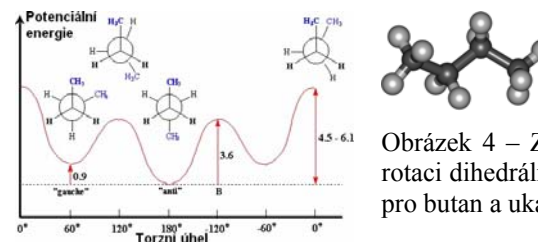


Obrázek 3 – Ukázka průběhu vazebného potenciálu trigonálního uhlíku.

$$E_{\text{úhel}} = \frac{1}{2} k_{\text{úhel}} (\alpha - \alpha_0)^2 \quad (4)$$

Dihedrání úhly

Dihedrání úhly používáme k vyjádření energie závislé na vyklonění atomu z roviny určené třemi dalšími atomy. Opět zde promlouvá repulze, přílišné přiblížení atomů se projeví nárůstem potenciální energie. Klasickou ukázkou je otáčení kolem středové vazby v butanu (viz obrázek 4).



Obrázek 4 – Závislost potenciální energie na rotaci dihedráního úhlu kolem středové vazby pro butan a ukázka konformace „anti“.

Nejstabilnější konformací butanu je „anti“ při dihedráním úhlu 180°. Při pohledu ve směru středové vazby je vidět, že v této konformaci jsou oba metylové konce butanu od sebe nejdál. Dále jsou stabilní i konformace „gauche“, kdy nejsou metylové skupiny v zákrytu ani spolu, ani vůči vodíkům. Z křivky lze rozhodnout, které minimum je nejhlubší, tzv. globální, a které je pouze lokální. Navíc z výšky bariér mezi jednotlivými minimy lze určit i kinetické vlastnosti – tj. jak rychle bude docházet k přeskokům mezi těmito konformacemi.

Naštěstí můžeme atomární parametry získat pečlivou analýzou a porovnáváním experimentálních dat pro stejné typy atomů. Sbírkou těchto parametrů se označují termínem známým ze sci-fi literatury - „silová pole“ (force-field). Název sice připomíná obranu kosmických lodí před phasery a torpédy zákeřných Borgů, Harkonnenů či Impéria, ale ve skutečnosti jde o soubor silových konstant používaných pro rovnici (2).

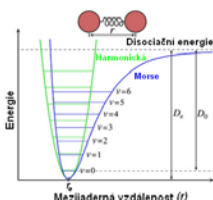
Vazebné potenciály používáme pro skupiny atomů, které jsou spolu spojeny jednou vazbou (vazby), dvěma vazbami (úhly), či třemi vazbami (dihedrální, neboli torzní úhly). Nevazebné potenciály naopak vztahujeme na všechny atomy, neboť se jedná o interakce atomů přes prostor a odpovídají nestlačitelnosti atomů (repulze) a jejich vzájemnému elektrostatickému působení (elektrostatika a disperze). V následujících odstavcích se na jednotlivé členy podíváme blíže.

Vazby (a trocha repulze)

Jednoznačně nejdůležitějším členem v molekulární mechanice jsou vazby, které drží jednotlivé atomy u sebe a spojují je do molekul. Vazby jsou v běžných molekulách poměrně silné a jejich rozvolnění je vlastně poměrně výjimečné. Pro rozdělení vazby, totiž musíme do systému přidat dostatečnou energii, abychom překonali energetickou bariéru a atomy od sebe mohly disociovat. Nejmenší energie nutná k překonání této bariéry se nazývá disociační energie.

Naproti tomu, pokud bychom se rozhodli atomy k sobě ještě víc přibližovat, začnou se elektronové obaly těchto atomů značně odpuzovat a zabrání tomu, abychom spojili jádra těchto atomů. Zde se k elektrostatické repulzi stejně nabitých jader přidává i kvantová repulzní interakce vycházející z Pauliho vylučovacího principu, což je jeden ze základních kamenů kvantové mechaniky. Výsledkem existence repulze je, že se atomy drží od sebe a k jaderné fúzi je zapotřebí velkých energií dostupných jen například ve Slunci nebo v urychlovačích.

Pokud bychom proměřovali energii páru atomů v závislosti na jejich vzájemné vzdálenosti, byl by výsledkem graf ve tvaru nálevky s obrovskou energií v blízkých vzdálenostech, kde úřaduje repulze. V rovnovážné vzdálenosti najdeme minimum potenciální energie a s rostoucí vzdáleností znovu roste i energie, až dojde k disociaci vazby a energie je nulová, tj. atomy už nic netáhne k sobě (viz obrázek 2).



Obrázek 2 – Porovnání vazebných křivek pro dva atomy vyznačující pozici energetického minima v rovnovážné vzdálenosti r_e a výšku bariéry disociační energie D_e v průběhu Morseho potenciálu imitujícího reálný průběh křivky a v harmonickém potenciálu často používanému v molekulárním modelování.

Zadání úloh 2. série 10. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: 3D chemical puzzles

(8 bodů)

Autoři: Luděk Míka, Jan Bartoň

Some triangles are printed on a sheet of paper attached to this brochure. Each triangle contains 3 clues and one central symbol.

First, cut out the triangles. Next, glue them together to form an icosahedron by connecting edges with matching clues. When you complete the icosahedron, you can read the resulting sentence according to the following rule:

Turn your icosahedron to the orientation shown on Figure 1. The first triangle and its orientation are shown on Figure 2. Now read the central symbols (so your sentence should start with letter C): the arrow points in the direction of reading. Each face can be used only once.

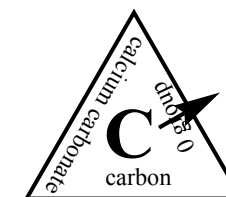


Figure 1 - Direction of reading for the solution Figure 2 - First triangle

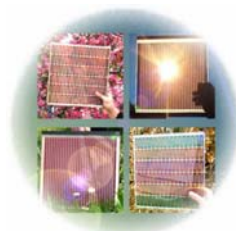
1. Fold the icosahedron to get the result. Write down the resulting sentence. Do not send us your folded icosahedron!

Questions 2-4 may be answered in Czech language subject to a penalty of one point.

- Write all the pairs of matching clues into the table. Explain why you chose the pairs for “plum pudding” and “barn”. What do these mean?
- Three central symbols are not symbols for elements. What do symbols R_y and M stand for in chemical studies? Sometimes the abbreviation “st” is used to describe that standard conditions were used. Write down the standard conditions.
- Is it possible for inorganic crystals to form in the shape of an icosahedron? Why/Why not?
- How much time did you spend on solving this puzzle? This question is only for our statistics, you will get no points.

Úloha č. 2: Graetzelův solární článek**(11 bodů)**

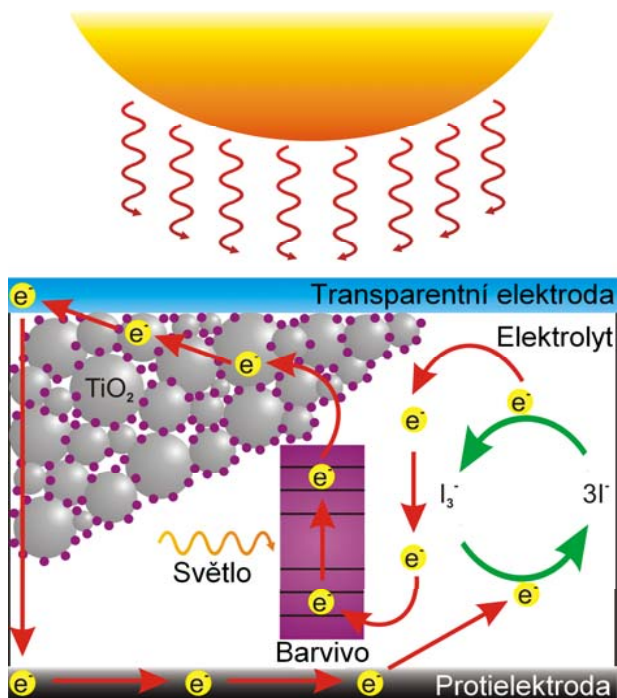
Autoři: Karel Berka, Kateřina Holá



Hlavním zdrojem energie ve Sluneční soustavě je Slunce. Není proto divu, že na získávání energie ze slunečního svitu se soustředí mnoho současných výzkumů a je i nadějí na ekologický zdroj energie, byť poslední dobou poněkud zprofanovaný.

Existuje spousta druhů solárních článků převádějících světlo na elektrickou energii, ale zde se zaměříme na poměrně levné solární články, které používají organická barviva a nanočástice k záchytu fotonů. Těto třídy solárních článků se také podle jejich objevitele říká Graetzelovy solární články.

Nejčastější typy solárních článků, které dnes vidíte na polích a střeších jsou křemíkové solární články. Jejich výroba je velice energeticky náročná a tudíž drahá. V této úloze se ale zaměříme na jinou třídu solárních článků – Graetzelovy solární články, které využívají nanočástice a organická barviva a jejich výroba je mnohem levnější.



Drobnou nevýhodou návrhu molekuly v počítači (*in silico*) ovšem může být⁸ to, že navržená molekula nemusí reálně existovat, nebo být tzv. „uvařitelná“. Například molekulární panáček z předchozího obrázku by pravděpodobně procházel tautomerizací a místo hydroxyly by měl na platině koordinované vody a skupinu NO₂. O snadnosti jeho syntézy upřímně pochybujeme.

Proto se do molekulárního modelování na počítačích přidávají fyzikální modely, které popisují chování jednotlivých částic v systému, a to buď na úrovni atomů, nebo přímo elektronů. V tomto dílu zůstaneme v popisu jen na úrovni atomů – v tzv. molekulární mechanice.

Molekulární mechanika

Molekulární mechanika se snaží popsat vzájemné interakce mezi jednotlivými atomy, ať už jsou spojeny vazbami, nebo se jen potkávají při volném pohybu prostorem. Především musíme být schopni popsat, jakou energii má konformace naší molekuly. K tomu musíme jednak vědět, jak je pospojovaná, ale také i jakou silou drží pohromadě a jakými silami na ni působí její okolí. Potenciální energii molekuly v dané konformaci udává následující rovnice:

$$E_{pot} = E_{vazebné} + E_{nevazebné} \quad (1)$$

přičemž jednotlivé vazebné a nevazebné členy (potenciály) můžeme rozepsat:

$$E_{pot} = \sum \text{Energie pružnosti vazeb} + \sum \text{Energie ohybání vazebných úhlů} + \sum \text{Energie deformace torzních úhlů} + \sum \text{Energie van der Waalsových interakcí} + \sum \text{Energie elektrostatických interakcí} \quad (2)$$

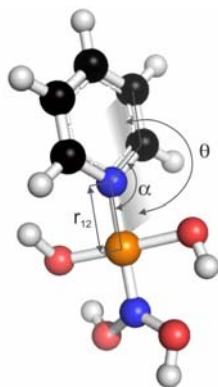
- suma přes všechny vazby - suma přes všechny vazebné úhly - suma přes všechny torzní úhly

- suma přes všechny dvojice atomů - suma přes všechny dvojice atomů

vazebné členy
nevazebné členy

Abychom mohli rovnici pro potenciální energii molekuly skutečně používat k modelování, potřebujeme znát vazebné a nevazebné atomární parametry – hmotnosti atomů a jejich vaznost, silové konstanty a délky vazeb, typické úhly a dihedrální úhly a silové konstanty s nimi spojené, parciální náboj, atomární poloměr a podobně.

⁸ zvláště, pokud pracujete s nerudnými experimentátory... :o)



xyz – pozice jednotlivých atomů v jednotlivých osách

```
Pt 0.000 0.000 0.000
N  1.700 0.000 0.000 ...
  x      y      z
```

z-matic – relativní pozice vůči referenčnímu bodu

1	Pt						
2	N	1.7	1	(r_{12})			
3	C	1.5	2	120.0	1	(α)	
4	C	1.4	3	120.0	2	180.0	1 (θ)
5	C	1.4	4	120.0	3	0.0	2...
α	atomu	délka k	úhel k	torze k			

Obrázek 1 – Molekulární panáček se sumárním vzorcem $\text{PtC}_5\text{N}_2\text{O}_4\text{H}_9$, a ukázkou jeho počítačového zápisu v kartézských souřadnicích a z-matici.

V kartézském zápisu ukládáme pro každý atom⁶ 3 souřadnice (x,y,z) vůči referenčnímu bodu na souřadnicích $(0,0,0)$. Vzdálenost mezi dvěma atomy je dána rozdílem mezi vektory těchto dvou atomů. Pro jednoznačný popis molekuly potřebujeme v 3N souřadnic, kde N je počet atomů. Kartézský zápis je jednoduchý a používá se především tam, kde je v systému atomů resp. molekul hodně a potřebujeme rychle počítat jejich vzájemné vzdálenosti – typicky v molekulové dynamice, na kterou ještě přijde řeč.

Zápis v z-matici na to jde jinak – stanovíme si referenční atom⁷ v molekule a další atomy k němu přidáváme pomocí definic tzv. vnitřních souřadnic. Pozici druhého atomu následně definujeme jeho vzdáleností r_{12} k referenčnímu atomu. K určení pozice třetího atomu nám vzdálenosti už nestačí, ale musíme definovat i úhel α jaký spolu všechny tři atomy svírají. Čtvrtý atom musí mít definován kromě vzdálenosti k jednomu z atomů a úhlu k dalšímu i torzní úhel θ , který definuje vyklonění atomu z roviny předchozích tří atomů. K zápisu z-maticy potřebujeme jen 3N-6 souřadnic, takže se používá tam, kde pracujeme s malým počtem atomů, kde je úspora šesti koordinát stále výhodná, případně tam, kde se snažíme analyzovat křivky podél nějaké vnitřní koordináty, kterou definujeme v z-matici. Typicky se z-maticový zápis používá v kvantové mechanice, případně v dokování.

⁶ případně jeho jádro, jestliže používáme kvantovou mechaniku

⁷ referenční bod nemusí být atomem, může být definován i jinde v prostoru – například pro zápis benzenu v z-matici je výhodné stanovit si referenční bod ve středu aromatického kruhu. Takto definovanému bodu říkáme pseudoatom nebo také dummy atom.

Fotony projdou přes transparentní elektrodu a jsou zachyceny barvivem. Nejčastěji jsou to organokovové sloučeniny ruthenia, které mají poetické názvy jako třeba „N3 barvivo“ nebo „černé barvivo“. Barvivo je naneseno na nanoporézním oxidu titaničitém, který zajišťuje odvod elektronů na elektrodu. Dopadem světla se barvivo excituje a uvolní elektron. Volný elektron je následně odchycen povrchem oxidu titaničitého. Po jeho povrchu je následně odveden na elektrodu, která je většinou z vodivého transparentního materiálu. Barvivo ale následně elektron chybí, takže si ho odebere z elektrolytu, což bývá vodný roztok jodidů, které uvolní elektrony při oxidaci na trijodid. Kruh uzavírá regenerace jodidu redoxní reakcí na druhé elektrodě, tzv. protielektrodě.

- Určete, zda je transparentní elektroda anoda, nebo katoda.
- Jakým redoxním dějem se jodid na protielektrodě regeneruje? Napište a vyčíslete tuto redoxní reakci.
- Vysvětlete, proč je jód nerozpustný ve vodě, ale přitom je rozpustný v roztocích jodidů.

Důvodem, proč se používají v Graetzlových článcích nanomateriály, je krátká doba života excitovaného elektronu za kterou urazí nejvýše 10 nm od místa svého vzniku. A proto musí mít elektron právě takovou maximální vzdálenost od místa excitace k povrchu oxidu titaničitého. Jinak by se elektron rekombinoval zpět v barvivo a nezískali bychom elektrický proud. Čím větší tedy bude plocha dotyku barviva s povrchem nanoporézního oxidu titaničitého, tím větší procento elektronů se podaří vyprodukovat.

- Mějme článek s hranami $1 \times 1 \times 0,5$ cm. Polovina objemu článku je tvořena oxidem titaničtým a polovina barvivem. Určete jak je velký povrch kontaktu mezifází mezi TiO_2 a barvivem, pokud:
 - horní polovinu článku vyplňuje 2,5 mm tlustý a pro barvivo nepropustný blok TiO_2 a spodní polovinu vyplňuje barvivo, nebo
 - v oxidu titaničitém jsou samostatné válcovité nanopóry o průměru 20 nm vyplněné barvivem.

Tloušťka článku pro změnu odpovídá za množství absorbovaného světla podle Lambert-Beerova zákona:

$$-\log \frac{I}{I_0} = A = c \cdot \varepsilon_\lambda \cdot L, \quad (1)$$

kde I_0 je intenzita vstupního světla, I je intenzita světla prošlého, A je absorbance, c je koncentrace pohlcující látky ve vzorku v $\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}$, ε_λ je molární absorbance

při dané vlnové délce v jednotkách $\text{mol}^{-1} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mm}^{-1}$ a L je tloušťka optické dráhy v mm, na níž je světlo pohlcováno.

10. Jestliže článek o tloušťce 1 mm absorbuje jen 50 % světla, jak tlustý článek se stejným složením musíme mít, aby absorboval 99,9 % světla?

Pro zachyt fotonů je důležité, aby foton měl dost energie na excitaci jednoho elektronu tak, že dojde k jeho uvolnění.

11. Rozdíly mezi redoxními potenciály základní hladiny a volného elektronu „černého barviva“ a „N3 barviva“ jsou 1,6 V a 1,8 V. Jaká je nejdelší vlnová délka fotonu, kterou je článek s „černým“ a „N3 barvivem“ schopen zachytit?

12. Které z barviv zachytí celé viditelné spektrum? O kterou část viditelného spektra je chudší druhé z barviv z předchozí otázky?

13. Článek poskytuje napětí 0,7 V. (Toto napětí je určeno rozdílem mezi Fermiho hladinou TiO_2 a redoxním potenciálem I_3^-/I^- páru, které jsou v dotyku s elektrodami.) Určete teoretickou účinnost článku s „černou barvou“, pokud ji budete počítat jako podíl získané elektrické energie z jednoho fotonu a energie fotonu s vlnovou délkou 550 nm. Dále odhadněte skutečnou účinnost, pokud víte, že článek úspěšně přemění pouze 80 % fotonů (zbytek se ztratí na odrazu a neúspěšných excitacích).

Výpočetní chemie II – Hemžení atomů aneb molekulové modelování

Autoři: Karel Berka, Ondřej Demel, Iva Voleská



“Everything that living things do can be understood in terms of the jiggling and wiggling of atoms”

„Vše, co živé objekty provádí, můžeme porozumět jako vrtění a kroucení jednotlivých atomů, z nichž se skládají.“

Richard Feynman

V minulém díle jsme uvedli obor výpočetní chemie a dnes se pustíme do její části, které se souhrnně říká molekulové modelování. Zaměříme se na to, jak se pozice jednotlivých atomů ukládají v počítačích a jak je poté umíme zobrazovat, optimalizovat nebo dokonce rozpohybovat.

Jak modelovat molekuly?

V podstatě nejde o nic jiného, než o použití znalosti známých geometrických vazebných úhlů a vzdáleností jednotlivých atomů při jejich spojování vazbami do molekul. Pokud máte molekulovou stavebnici, plastelínu nebo marshmallow se špejlemi, můžete si model molekuly vyrobit i doma v kuchyni. Například atomy uhlíku jsou čtyřvazné a podle toho, jaké násobné vazby z uhlíku vycházejí, může mít vazby uspořádané v různých geometriích – uhlík s jednoduchými vazbami preferuje uspořádání do tetraedru s vzájemným úhlem mezi vazbami $109,6^\circ$ a uhlík s dvojnou vazbou najdeme v trigonálním uspořádání s úhlem mezi vazbami 120° . Když tyto úhly použijete při určování, kde do plastelíny zabodnout špejle jako vazby, už vlastně modelujete molekuly.

S molekulovým modelováním s molekulovou stavebnicí si hráli i nobelisté James Watson s Francisem Crickem, když navrhovali strukturu DNA. Jejich modelová struktura poté napomohla vysvětlit, jak vlastně DNA uchovává genetickou informaci, i jak se může genetická informace kopírovat. Podobné vhledy, jak molekuly fungují, jsou tím hlavním důvodem, proč se molekulární modelování používá.

Můžeme připravovat i modely nových a neobvyklých molekul – například panáčka jako na následujícím obrázku. Počítače navíc ulehčily molekulární modelování díky použití tzv. molekulární počítačové grafiky. Aby počítač věděl, jak jsou jednotlivé atomy spojeny, stačí mu znát, jaké jsou pozice jednotlivých atomů v prostoru. V principu existují dva základní typy zápisu molekulární struktury ve virtuálním prostoru – kartézský zápis a tzv. z-matice.

Spálením 1 kg prachu se uvolní energie 665 kcal, spálením 100 kg prachu je to tedy 66500 kcal.

Ohřát můžeme $66500/15 = 4433,3$, tedy 4433 hrnečků čaje. Vzhledem k tomu, že Sarumanovo vojsko čítalo 15-20 000 skřetů, bylo by jich dost jen o studené vodě...

13. Výbušniny se dělí na střeliviny, třaskaviny a trhaviny. Jak už název napovídá, střelný prach patří mezi střeliviny.
14. Deflagrace neboli explozivní hoření je rozklad, jehož (detonační) rychlost nepřekročí rychlost zvuku, tedy nějakých 330 m/s. Pro zajímavost, střelný prach má detonační rychlost okolo 330 m/s, Semtex 7400 m/s.
15. Onou látkou je nám již důvěrně známý dusičnan amonný, podle něhož se označují jako DAP, tedy Dusičnan Amonný + Palivo. Jako palivo se používají různé chemikálie, např. nitrofenoly, ale dá se použít i obyčejná nafta.

Otázka 1 – 0,5 b., 2 – 0,5 b., 3 – 0,5 b., 4 – 0,5 b., 5 – 0,5 b., 6 – 0,5 b., 7 – 0,5 b., 8 – 1 b., 9 – 0,5 b., 10 – 1 b., 11 – 2 b., 12 – 2 b., 13 – 0,5 b., 14 – 0,5 b., 15 – 1b. Celkem 14 bodů.

Úloha č. 3: Syntéza léčiva

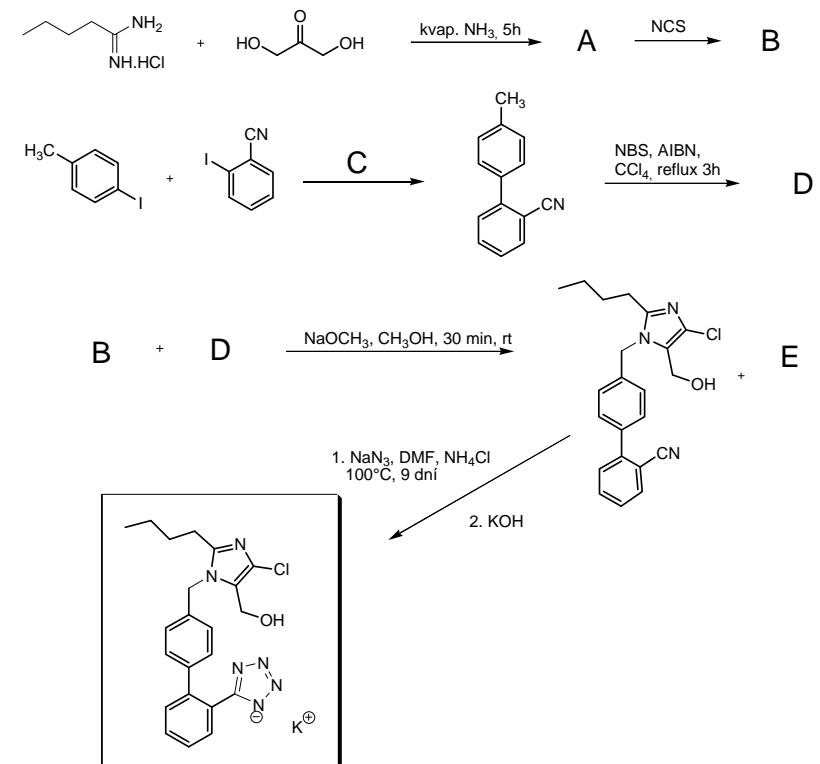
(10 bodů)

Autor: Marek Buchman



Tato úloha sa zaoberá syntézou významného liečiva, ktoré je inhibítorom hormónu peptidickej povahy, ktorý okrem iného v tele pomáha dlhodobo regulovať krvný tlak a objem krvi v tele.

Syntézu draselnej soli tohoto liečiva popisuje nižšie uvedená schéma. Oba kľúčové medziprodukty (B a D) tejto konvergentnej syntézy sú pripravené sledom dvoch reakcií z komerčne dostupných východiskových látok. Po vzájomnej reakcii týchto dvoch stavebných blokov vzniká zmes produktov, ktorá sa podrobí kolónovej chromatografii na silikagéli. Po prevedení posledného reakčného kroku sa finálny produkt izoluje ako draselná soľ.



1. Doplňte vzorce meziproductov A, B, D.
2. Doplňte chýbajúci reaktant a podmienky, ktoré sú potrebné na reakciu C.
3. Coupling medzi 4-iódtoluénom a 2-iódbenzonitrilom za prítomnosti C je pomenovaný podľa známeho chemika, čo reakciu tohoto typu objavil. Uveďte jeho celé meno a vysvetlite, čo pojem coupling znamená.
4. Napíšte vzorec izoméru E, ktorý vzniká ako vedľajší produkt.
5. Vysvetlite pojem „konvergentná syntéza“.
6. Stručne vysvetlite, čo je to kolónová chromatografia, a uveďte dôvod jej použitia v syntéze.

Napíšte vzorce a názvy všetkých látok v syntéze, ktoré sú označené skratkami (sú 4).

9. Dusičnan amonný je silne navlhavý, absorbuje vzdušnú vlhkosť. Střelný prach s jeho prídatkom by se během skladování roztekl na kaši. Mokrý směs se velice špatně zapaluje, způsobuje tedy selhávání.
10. Procentuální množství KNO_3 :

$$\begin{aligned}
 w_{KNO_3} &= \frac{m_{KNO_3}}{m_{celková}} = \frac{m_{KNO_3}}{m_{KNO_3} + m_S + m_{uhlí}} = \\
 &= \frac{n_{KNO_3} M_{KNO_3}}{n_{KNO_3} M_{KNO_3} + n_S M_S + n_{uhlí} M_{uhlí}} = \\
 &= \frac{74 n_{KNO_3}}{74 M_{KNO_3} + 30 M_S + 16 M_{uhlí}} = 0,757 \Rightarrow 75,7 \%
 \end{aligned}$$

Obdobně pro ostatní složky dostaneme poměr $KNO_3:S:uhlí = 75,7:9,7:14,6$. Tento výsledek velice dobře koresponduje se skutečně používaným poměrem.

11. Nejdříve musíme z produktů vybrat látky, které jsou za daných podmínek plynné, objem pevných produktů oproti plynným budeme zanedbávat. Při spálení množství látek odpovídající jednomu chemickému obratu vznikne celkem 114 mol plynných látek. Toto odpovídá:

$$V = \frac{nRT}{p} = \frac{114 \times 8,314 \times 298}{101325} = 2,79 \text{ m}^3 = 2790 \text{ dm}^3$$

Navážka bude:

$$m = m_{KNO_3} + m_S + m_{uhlí} = 74 M_{KNO_3} + 30 M_S + 16 M_{uhlí} = 9,9 \text{ kg}$$

Objem navážky tedy bude:

$$V_{navážka} = \frac{m_{navážka}}{\text{násypná hustota}} = 11 \text{ dm}^3$$

Poměr objemů tedy bude:

$$r = \frac{2790}{11} = 254$$

Objem nálože se tedy po výbuchu zvětší 254krát. Ve skutečnosti to bude daleko více, protože ihned po výbuchu nemají plyny teplotu 25°C , ale asi 2000°C .

12. Z definice kalorie vyplývá, že je to energie potřebná k ohřátí 1 g vody o 1°C , z tohoto se spočte, že na ohřátí jednoho skřetího čaje je spotřebováno $200 \times 75 = 15000 \text{ cal} = 15 \text{ kcal}$

Úloha č. 5: Orthancův oheň**(14 bodů)**

Autor: Luděk Míka

- Hlavním cílem čínských alchymistů bylo dosáhnout nesmrtnosti. Podle legend se jim to i ve vzácných případech podařilo, viz např. Úplné životopisy nesmrtných.
- Černý prach připravený podle původní receptury má šedou až hnědou barvu. Pokud byste si ale koupili černý prach komerční, bude mít opravdu temně černou barvu. Zrnka střelného prachu se totiž potahují vrstvičkou grafitu, čímž se dosáhne menší navlhavosti a zamezí se náhodnému výbuchu způsobenému statickou elektřinou.
- Empirický vzorec dřevěného uhlí odpovídá zhruba C_7H_4O , černé uhlí je prakticky čistý uhlík. Navíc je daleko pevnější, špatně se mele a drtí. Důležitá je také porozita materiálu, dřevěné uhlí je porézní, má tedy obrovský povrch, díky kterému černý prach rychle hoří. Černé uhlí se tudíž použít nedá.
- Vzhledem k tomu, že se síra v přírodě nachází ryzí, stačilo jen najít vhodné naleziště a sesbírat ji ze země. Naleziště síry bývají v okolí sopek a sirných pramenů.
- Původ tohoto slova lze hledat ve slově led, ledek je malý led. Podobnost těchto látek je dána chladivou chutí ledku, když si necháte trošku rozpustit na jazyku.
- Ve chlévech a stájích se hromadí biologický odpad, ten je nitrifikačními bakteriemi oxidován na dusičnany, které lze následně vyseparovat. Oxidace probíhá v několika stupních, přes NH_4^+ , NO_2^- až na NO_3^- .
- Úplně nejjednodušším způsobem by bylo smíchat NH_4NO_3 s KOH a následně povařit, stejně tak by šlo smíchat dusičnan amonný s potaší a následně KNO_3 vyseparovat. Všechny tyto chemikálie a postupy byly známy už v Agricolově době. Preparace KNO_3 by byla možná také pomocí iontoměničů, ty ale Agricola opravdu znát nemohl. Navíc tato metoda nepatří k nejlevnějším, to by pak už mohla být výhodnější i příprava dusičnanu draselného z HNO_3 a KOH.
- Haber-Boschova syntéza je vysokotlaká (50-1000 atm) syntéza amoniaku z prvků při vysokých teplotách (500 °C) katalyzovaná kovovým železem. Příspěvek této syntézy k výrobě černého prachu spočívá v tom, že se z amoniaku vyrábí kyselina dusičná. Na rozdíl od N_2 se NH_3 dá poměrně snadno zoxidovat. Od kyseliny dusičné k dusičnanům je pak už jen krok.

Úloha č. 4: Narsil**(14 bodů)**

Autor: Pavel Řezanka



*Meč, jenž byl zlomen, hledej:
v Imladris přebývá;
tam lepší radu čekej
než kouzla Morgulská.
Tam spatříš znak, že sudba
je blízko. Procitne
Isildurova zhouba
a pŮlčik povstane.⁵*

Róza odložila knihu a zapřemýšlela. V hlavě se jí vybavila rodinná pověst předávaná z generace na generaci, že prý jejich dávný předek Jetelvěd Kuřorád získal několik úlomků Narsilu. „Ale ne, to nemůže být pravda,“ pomyslela si. „Ale co když je?“ Celá se zachvěla pomyšlením, že v truhličce, která je nyní uložena ve sklepech a která byla spolu s pověstí předávána po generace, jsou skutečně kousky legendárního meče.

Róza, studentka chemické vysoké školy, si vždy dokázala poradit, a tak si už druhý den nesla do školy truhličku se čtyřmi kovovými úlomky. Po krátkém hledání v knihách měla jasno. Je třeba stanovit železo, mangan, křemík a chrom. Na každé stanovení použije jeden úlomek. V oceli je přítomen i uhlík, ale ten se rozhodla zjistit pouze dopočtením do 100 %, neboť další možné přítomné prvky by měly být obsaženy v řádově menších množstvích.

Pro stanovení železa rozpustila kousek meče o hmotnosti 1,065 g v 30 ml koncentrované HCl, roztok přefiltrovala, zahustila, přidala pár kapek koncentrované HF a 0,5 g $KClO_3$ a chvilku roztok povařila. Do roztoku pak přikapávala chlorid cínatý, dokud se nezměnila barva z oranžové na světle zelenou. Po ochlazení přidala 20 ml 5% roztoku $HgCl_2$ a 50 ml Reinhardtova-Zimmermannova roztoku a titrovala odměrným roztokem manganistanu draselného ($c = 0,0955 \text{ mol/l}$) do stálého růžového zbarvení. Spotřeba činila 39,0 ml.

- Napište a vyčíslete rovnice reakcí železitých a cínatých iontů, cínatých iontů a chloridu rtuťnatého, železitých iontů a manganistanových iontů v kyselém prostředí.
- Vypočítejte hmotnostní zlomek železa v meči a uveďte, jak se obecně tato metoda stanovení železa jmenuje.

⁵ J. R. R. Tolkien: Pán prstenů – I. Společenstvo prstenu, Mladá fronta Praha 1990, přeložila Stanislava Pošustová, 1. vydání.

- Proč při titraci nevádí barva vznikajících železitých iontů?
- Proč se do roztoku přidává HgCl_2 ?
- Jaké závažné chyby se dopustila Róza při analýze tak vzácného vzorku?

Pro stanovení manganu rozpustila kousek meče o hmotnosti 0,5102 g ve 20 ml zředěné H_2SO_4 (1:5) a 10 ml zředěné HNO_3 (1:1). Po rozpuštění převedla vzorek kvantitativně do 250 ml odměrné baňky a doplnila ji po rysku vodou. Takto upravený vzorek odlila do kyvety a změřila jeho absorpenci při vlnové délce 526 nm. Získaná hodnota absorpance byla 0,165.

- Jaké barvě odpovídá záření o 526 nm? Jakou barvu má roztok absorbující toto záření?
- Jaká entita (molekula, ion) obsahující mangan je stanovována? Napište vzorec.
- Vypočtete hmotnostní zlomek manganu v meči, je-li $\epsilon_{526} = 2331 \text{ l}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$ a pro absorpenci (A) platí: $A = \epsilon \cdot b \cdot c$, kde b je 1 cm a odpovídá délce kyvety, ve které se analyzuje daný roztok. Uveďte, jak se obecně tato metoda stanovení manganu jmenuje.

Pro stanovení křemíku rozpustila za tepla kousek meče o hmotnosti 2,741 g ve 35 ml zředěné HCl (1:1). Pak vzorek zoxidovala 25 ml HNO_3 a odpařila do sucha. Odparek rozpustila ve 20 ml HCl , zředila na objem 100 ml, krátce povařila a přefiltrovala. Sraženinu na filtru promývala střídavě horkou a studenou HCl (1:10) a nakonec studenou vodou. Filtrát znovu zahustila a zfiltrovala za stejných podmínek. Filtry složila do platinového kelímku, vysušila je, spálila, vyžihala a zvážila kelímek, který obsahoval surový SiO_2 ($m_1 = 26,506 \text{ g}$). Odparek v kelímku pak ovlhčila několika kapkami vody, přidala pár kapek H_2SO_4 a 2 ml HF . Roztok zvolna odpařila, vyžihala a znovu zvážila kelímek obsahující už jen nečistoty neobsahující křemík ($m_2 = 26,493 \text{ g}$).

- Proč Róza k odparku v kelímku přidala HF ?
- Vypočtete hmotnostní zlomek křemíku v meči a uveďte, jak se obecně tato metoda stanovení křemíku jmenuje.

Nakonec zbylo Róze stanovení chromu. Pro jeho stanovení našla řadu postupů, ale protože se jí už nechtělo opět titrovat anebo shánět specifická činidla pro tvorbu barevných komplexů, rozhodla se použít metodu atomové absorpční spektrometrie (AAS).

- Napište název specifického činidla pro tvorbu barevných komplexů s chromem, které je zmíněno v předchozím odstavci.

Úloha č. 4: Lembas – energie sbalená na cesty

(8 bodů)

Autorka: Jana Zikmundová

- Sušenky jsou kousky upečeného těsta. Oplatky jsou oproti tomu plátky obvykle ne moc chuťově výrazného těsta, které jsou po upečení spojené náplní. Popis lembasu tedy stejně jako esíčka odpovídá sušence a ne oplatce, což jsou tatranky a miňonky.
- Jedna kalorie odpovídá 4,185 joulu.
- Průměrná denní spotřeba odpovídá 16 hodinám bdění a 8 hodinám spánku se čtvrtinovou energetickou spotřebou. Průměrná spotřeba pro hodinu bdění se tedy spočte podle rovnice:

$$E_{den} = 16x + 8\frac{x}{4} = 18x$$

Na hodinu bdění potřebuje Legolas 500 kJ, Sam 600 kJ a Boromir 750 kJ.

- Denní program Společenstva na pochodu bude: 8 hodin spánku se čtvrtinovou spotřebou, 11 hodin chůze se spotřebou energie vyšší o 22 % a 5 hodin jiných činností, které si vyžadají průměrnou hodinovou spotřebu energie vypočítanou v otázce 3. Za den cesty tedy spotřebují:

$$E_{cesta} = 11 \cdot 1,22x + 8\frac{x}{4} + 5x = 20,42x,$$

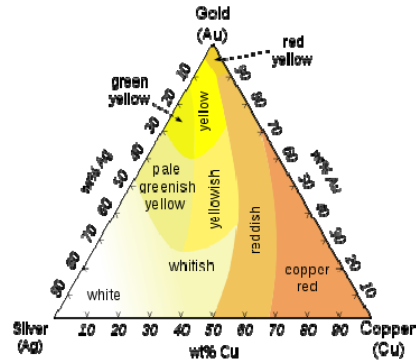
což je u Legolase 10210 kJ, Sama 12252 kJ a Boromira 15315 kJ.

- Jeden lembas by měl obsahovat 10210 kJ. Pro Sama by bylo potřeba 1,2 lembasu a pro Boromira 1,5 (poměr jejich denních energetických potřeb).
- Nejprve je třeba kcal přepočítat na kJ (tj. vynásobení 4,185): sádlo 3775 kJ/100 g, cukr 1670 kJ/100 g a tatranka 1021 kJ. Jeden lembas tedy odpovídá 270 g sádla, 611 g cukru nebo deseti tatránkám.
- Nejdříve by cestovatelům chyběly patrně minerální látky (Na, K, Mg), které budou neustále vylučovat, ale doplňovat je budou jen v omezené míře. Vzhledem k projímavým účinkům tučné stravy bude vylučování ještě vyšší. Jejich úbytek by se také projevil závažnějšími důsledky než úbytek vitamínů rozpustných ve vodě, které také budou brzo postrádat. Ostatní živiny jim budou také docházet, ale ne tak rychle a mohou být buď v omezené míře syntetizovány, nebo přesunuty z jiných částí těla.

Otázka 1 – 1 bod, 2 – 0,5 bodu, 3 – 1,5 bodu, 4 – 1,5 bodu, 5 – 1 bod, 6 – 1,5 bodu, 7 – 1 bod. Celkem 8 bodů.

Pd, Pt. Celý problém lze mnohem elegantněji vyřešit použitím jádra z jiného kovu, například wolframu, a prsten pouze potáhnout zlatým nanofilmem.

Otázka 1 – 1,2 bodu, otázka 2 – 1 bod, otázka 3 – 0,7 bodu, otázka 4 – 0,6 bodu, otázka 5 – 0,4 bodu, otázka 6 – 1,6 bodu, otázka 7 – 1 bod, otázka 8 – 0,7 bodu, otázka 9 – 1 bod, otázka 10 – 0,8 bodu. Celkem 9 bodů.



Závislost barvy slitiny na poměru Au-Ag-Cu

Zdroj: Wikipedia

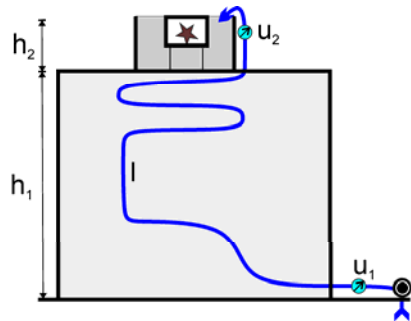
Pro stanovení chromu rozpustila za tepla kousek meče o hmotnosti 1,528 g ve 40 ml zředěné HCl (1:1), roztok přefiltrovala a doplnila do odměrné 250ml baňky. Pro jednobodovou kalibraci použila Róza dichroman draselný o hmotnosti 100 mg, který rovněž rozpustila do 250ml baňky. Oba vzorky pak analyzovala pomocí AAS a získala tak jejich hodnoty absorbancí: $A_1 = 0,215$ a $A_2 = 0,536$.

12. Vypočtete hmotnostní zlomek chromu v meči a stručně popište princip AAS a uveďte, pro stanovení kterých prvků je tato metoda vhodná.
13. Vypočtete obsah uhlíku v meči.
14. Jak se obecně jmenují metody použité k analýze Narsilu? Uveďte ještě dvě další založené na jiných principech.

Úloha č. 5: Zachraňte králíčka**(13 bodů)**

Autoři: Karel Berka, Iva Voleská

Petr se pomalu probouzel z divokého snu a ještě pomaleji začínalo do místnosti pronikat denní světlo. Unaveně a otráveně vstal, protože se měl připravovat na zkoušku z chemického inženýrství. S hrstí sena a jablkem popošel ke kleci, v níž pobýval jeho králíček. Jenže králíček tu nebyl. Porozhlédl se po místnosti, ale klec s králíčkem nikde. Jen na monitoru počítače poblikával nepřechtený e-mail. Překvapilo ho to. Kdo mu mohl během noci psát? Čekal, že objeví informaci o odložení nebo zrušení zkoušky, ale v textu se dozvěděl, že Běda odnesl králíčka a pokud si Petr nepospíší, tak králíčka utopí, upeče a sní. Byla tam také přiložena fotografie dřevěné bedny v barelu a nákres jakéhosi potrubí s připojenými rotametry. Petr odběhl do koupelny a chrstl si do obličeje ledovou vodou, aby se probral.



Obr. 1. Králíček v bedně a barelu

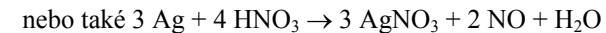
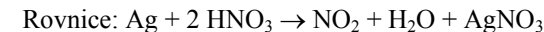
1. K měření čeho se používá rotometr?
2. Králíček v dřevěném boxu (ať živý, či mrtvý) připomíná jeden z paradoxů kvantové mechaniky. Který?

Petr zvažoval veškeré možnosti, kam dle fotografie mohl Běda králíčka schovat. Po chvíli se rozhodl mezi pouhými dvěma možnostmi – školní poloprovozní halou a starou chemickou továrnou za městem. Prohlédl si znovu fotografii a usoudil, že si pro králíčka dojede do továrny a hledat bude na střeše jedné z budov tvořících tovární komplex.

U nákresu byly dále zmíněny následující údaje:

- a) Čerpadlo sepne v 8:00 SELČ.
- b) Teplota čerpané vody je 10 °C. Hustota vody proudící v potrubí je při této teplotě $\rho = 999,6 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ a dynamická viskozita vody je $\mu = 1,308 \text{ cP}$.

7. Kupelace se prováděla ve speciálních nádobkách z porézního materiálu. Používaly se neglazované keramické nádoby, které se ještě pro zlepšení efektu vevnitř potíraly sedlinou z popela (buď z měkkého dřeva nebo kostí bez morku). Při kupelaci se stříbro obsahující příměsi smísilo s olovem a roztavilo za neustálého přístupu vzduchu (obvykle pomocí silného dmýchání). Olovo se zoxidovalo a pomohlo oxidovat další nečistoty, zatímco stříbro se neoxidovalo. Již ve starověku bylo takto možno připravit stříbro o čistotě 98-99%. Tuto metodu se ale nedalo použít k čištění zlata od stříbra, pouze na přečištění těchto dvou kovů od jiných. Na čištění samotného zlata sloužila cementace.
8. První metoda se nazývá kvartace neboli gradace. (Vzorek zlata se zvážil a přidaly se k němu další tři hmotnostní díly stříbra. Odtud tedy název = ze čtyř dílů. Slitina se poté zpracovala na tenké plechy, ty se daly do skleněné nádoby a zalily HNO_3 . Smyslem bylo dokonalé rozpuštění stříbra. Díky jeho nadbytku se vytvořily dostatečně velké póry, které opravdu zajišťovaly úplné rozpuštění. Kyselina se několikrát v průběhu procesu měnila, na závěr se zbylé zlato omylo vodou a zvážilo.)



Druhá metoda se jmenuje podle Archiméda. (Vyvážená páková váha s oběma předměty se ponořila do vody, a pokud měl předmět menší hustotu, tak ho voda nadnášela méně, což se projevilo vychýlením vah – metoda vychází z Archimédova zákona, velká výhoda byla nedestruktivita, ale malé předměty se takto stanovovat nedaly.)

Třetí metodou bylo tření o prubiřský kámen. (Opět téměř nedestruktivní metoda, která byla ovšem použitelná pouze pro slitiny zlato-stříbro a zlato-měď. Výsledná barva rýhy po otěru byla porovnána se vzory a stanovením se daly odlišit slitiny lišící se i v pouhých 2 % příměsí. K otěru se využíval často tmavý buližník. Metoda se dala ovšem i oxidit a návod na takový podvod obsahuje už papyrus Leyden X.)

9. Takovýmto látkám se říká termochromy nebo termotropní barvy (v praxi se s nimi lze setkat jako s termochromními barvami) a tento konkrétní přechod má tetrajodortuřnatan stříbrný – $\text{Ag}_2[\text{HgI}_4]$.
10. Vyhovět daným podmínkám je velmi obtížné. „Zlatou“ barvu mají slitiny $\text{Au}+\text{Ag}+\text{Cu}$ vyhovující poměrům na obrázku. Výrazněji vyšší teplotu tání má slitina $\text{Au}+\text{Rh}$ (již od 18 % hm. rhodia má teplotu tání přibližně 2000 °C, ale má bílou barvu). Tvrdost zlata lze zvýšit příměsí mnoha kovů, například Fe,

Úloha č. 3: Zlaté elfské ručičky**(9 bodů)**

Autoři: Ondřej Mangl a Jan Bartoň

- Chrysos – zlato; Argentos – stříbro, Asemos – elektrum; jazyk – starořečtina (lze uznat i řečtina)
- Všechny názvy až na *nub* jsou odvozeny od názvu žluté barvy v příslušných jazycích. *Nub* je odvozeno ze jména oblasti, kde byly v tehdejší době staroegyptské zlaté doly – Nubie.
- Jedná se o *papyrus Leiden X* a tento konkrétní postup v něm má pořadové číslo 25.
- Kamenec – $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$; sůl – NaCl ; misy – $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$
- Cementace. Metoda je založena na reakci křemičitanů v cihelném prachu se solí při vysoké teplotě za vzniku chlorovodíku. Ten dále reaguje s oxidy železa za vzniku FeCl_3 , který je při teplotách 700 a 800 °C ve formě par. Již tato sůl je vysoce korozivní, ale za takovéto teploty dochází navíc k jejímu rozkladu na FeCl_2 a Cl_2 . Vzniklý chlór v těchto podmínkách dokáže oxidovat všechny prvky ve slitině včetně stříbra, ovšem až na zlato.
- 1 starořecká mincovní mina = 434 ± 3 gramy (My pro výpočet použijeme hodnotu 431 g, protože ji Google nabízí jako nejčastější údaj.)
 $1,2646 \text{ min} = 545,042 \text{ g}$
Vzorek po třetí cementaci obsahoval 0,6 % hm. Ag – $545,042 \times 0,006 = 3,27 \text{ g}$ (zbytek, 541,77 g Au)
Výpočet jednotlivých složek se provede obyčejnou trojčlenkou:

Třetí cementace:

$$m_{\text{Ag}} = 3,27 \cdot \frac{100}{20} = 16,35 \text{ g} \quad V_{\text{navážka}} = \frac{m_{\text{navážka}}}{\text{násypná hustota}} = 11 \text{ dm}^3$$

Druhá cementace:

$$m_{\text{Ag}} = 16,35 \cdot \frac{100}{20} = 81,75 \text{ g} \quad m_{\text{Au}} = 570,284 \cdot \frac{100}{97} = 587,92 \text{ g}$$

První cementace:

$$m_{\text{Ag}} = 81,75 \cdot \frac{100}{20} = 408,75 \text{ g} \quad m_{\text{Au}} = 587,92 \cdot \frac{100}{98} = 599,92 \text{ g}$$

Původní látka obsahovala 408,75 g argentos a 599,92 g chrysos, což odpovídá 40,52 % hm. Ag a 59,47 % hm. Au.

- Příkon čerpadla, které čerpá vodu do potrubí k utopení králíčka je 0,1 koně (1 kůň $\equiv 735,5 \text{ W}$) a jeho účinnost je $\eta = 0,65$ a průtok u čerpadla je $F_1 = 0,2 \text{ l/s}$.
- Potrubí má délku 300 m a průměr 1 dm.
- Na potrubí je řada prastarých, opotřebovaných a již ne zcela funkčních místních odporů: (v závorce je uveden součinitel místního odporu ξ pro jeden daný prvek): 2 kolena 90° ($\xi = 3000$), 3 oblouky 180° s velkým poloměrem křivosti ($\xi = 5000$), 2 vodoměry ($\xi = 30000$), 2 střední kolenovité oblouky ($\xi = 2500$) a výtok ($\xi = 100$).
- V továrním komplexu je šest budov (A až F) o výškách A: 32 m, B: 27 m, C: 18 m, D: 15 m, E: 20 m a F: 10 m.
- Barel má válcovitý tvar a jeho poloměr je 0,5 m, spodní hrana klece je ve výšce 1 m a horní hrana klece je ve výšce 1,5 m nad dnem barelu.
- Barel se plní rychlostí $F_2 = 0,1 \text{ l/s}$.

Petr si uvědomil, že nejdříve musí určit, kolik má na záchranu králíčka času.

- Určete, v kolik hodin začne voda dosahovat spodního okraje klece a v kolik hodin už bude pozdě a králíček bude utopený (tj. celá klec bude pod vodou.)

Času není nazbyt. Vyrazil tedy směrem k továrně, ale uvědomil si, že nemá dost času vylézt na všechny budovy. Musí tedy zjistit, ve které budově se barel nachází. K tomu přece stačí spočítat výšku a podle ní se rozhodne, na které budově se králíček nachází.

Prvním krokem je spočítání mezní výšky (H_w), do které je schopno čerpadlo vyčerpat vodu. To je dáno výkonem čerpadla (N_v) dle vztahu:

$$H_w = \frac{N_v}{\rho \cdot F \cdot g}, \quad (1)$$

kde ρ je hustota kapaliny a g je tíhové zrychlení a F je průtok.

- Určete pracovní výšku čerpadla.

Nicméně kapalina tlačena potrubím klade čerpadlu dodatečný odpor, který je závislý na typu proudění.

- Napište jaké typy proudění kapaliny znáte.

Odpor kapaliny se dá vyjádřit jako tzv. ztrátová výška (h_z). Tu můžeme spočítat pomocí Darcy-Weisbachovy rovnice jako součet příspěvků pro přímé potrubí (první člen) a pro místní odpory na dalších prvcích (druhý člen).

$$h_z = \lambda \frac{l}{d} \frac{u^2}{2g} + \sum_{i=1}^n \xi_i \frac{u^2}{2g}, \quad (2)$$

kde l je délka potrubí, d je vnitřní průměr potrubí, u je rychlost proudění v m/s, ξ jsou odpory místních prvků a λ je funkcí Reynoldsova kritéria a pro naše proudění je rovno:

$$\lambda = \frac{64}{\text{Re}}, \text{ kde Re je Reynoldsovo kritérium: } \text{Re} = \frac{d u \rho}{\mu}, \quad (3)$$

kde μ je viskozita kapaliny. (Reynoldsovo kritérium rozhoduje o typu proudění).

6. Vypočítejte hodnotu Reynoldsova kritéria a hodnotu součtu místního odporu, pokud budete počítat s rychlostí změřenou u čerpadla $u_1 = 2,55 \cdot 10^{-2}$ m/s.

7. Vypočítejte ztrátovou výšku.

Pro výpočet výšky použijte upravenou Bernoulliho rovnici pro tekutinu proudící v potrubí mezi dvěma body 1 a 2:

$$\frac{P_1}{\rho_1 g} + \frac{u_1^2}{2g} \alpha_1 + h_1 + H_w = \frac{P_2}{\rho_2 g} + \frac{u_2^2}{2g} \alpha_2 + h_2 + h_z \quad (4)$$

Symbols mají výše uvedené významy, $P_{1,2}$ je tlak v daném bodě, $u_{1,2}$ je rychlost proudění tekutiny v dotyčných bodech, $h_{1,2}$ je polohová výška potrubí v dotyčném bodě, H_w je pracovní výška čerpadla, h_z je ztrátová výška, tj. výška ve které jsou započteny ztráty během proudění a $\alpha_{1,2}$ je Coriolisovo číslo, které je v našem případě rovno 2.

8. Vypočítejte výšku budovy, na níž se nachází králíček v bedně, a určete, o kterou z budov se jedná. Předpokládejte, že změna tlaku s výškou je zanedbatelná.

Petr se rozběhl k budově, na níž se měl nacházet králíček. Lezl po požárním žebříku a přibližně uprostřed našel lístek s informací, že jde správnou cestou a pokud chce vědět, jestli je králíček živý, tak musí určit účinnost jedné absorpce.

Plynná směs obsahuje 7 % mol. NH_3 , 20 % mol. vlhkosti a zbytek tvoří vzduch (78 % mol. N_2 , 21 % mol. O_2 a 1 % mol. Ar) a proudí rychlostí $5000 \text{ m}^3/\text{hod}$ při teplotě $20 \text{ }^\circ\text{C}$ a tlaku 1 bar. Absorpční kapalinou je čistá voda proudící rychlostí 50 l/min ($\rho = 998,2 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$). Z kolony vystupuje plyn, jehož složkami jsou zbytek NH_3 , vodní páry (25 % původního množství) a vzduch, a vodný roztok amoniaku s hustotou $\rho = 0,9732 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. Množství absorbovaného NH_3 bylo stanoveno v 10 ml roztoku titračně kyselinou sírovou o koncentraci $c = 1,955 \text{ mmol}\cdot\text{l}^{-1}$ se spotřebami 13,7; 8,6 a 8,8 ml H_2SO_4 .



1



2



3

Otázka 1 – 3 body, 2 – 1,5 bodu, 3 – 0,5 bodu, 4 – 1 bod, 5 – 1 bod a 6 – 1 bod. Celkem 8 bodů.

Pro výpočet zlomku, kolik nikotinu zůstane nespáleno, použijeme data pro kuřáka cigaret. Hmotnost nikotinu (obsažen ve 3 %) v denní dávce cigaret (20 kusů) bude: $m_2 = 920$ (váha cigarety) $\cdot 20 \cdot 0,03 = 552$ mg.

Kuřák ve skutečnosti do sebe dostane jen 14 mg nikotinu. Zlomek nespáleného nikotinu tedy je:

$$w_1 = \frac{14}{552} = 0,0254$$

Účinnost inhalace nikotinu je ve vodní dýmce jen 25 % oproti cigaretám. Celkové množství inhalovaného nikotinu tedy bude:

$$m_3 = m_1 \cdot w_1 \cdot 0,25 = 1,588 \text{ mg}$$

Vzhledem k tomu, že jich bude na dýmku s Jetelvědem šest, tak se tedy moc nezkouří.

- Zanedbání bylo oprávněné, protože inhalovaný nikotin tvoří pouze 2,5 % z celkového obsahu nikotinu. Navíc po započtení spalování celulosy, je toto procento vskutku zanedbatelné.
- Pro otrávení elfa nikotinem v panáku špiritusu je potřeba zvolit $LD_{100} = 2,5$ g/elf (perorálně). Na 5 elfů je tedy potřeba pětinasobek a to 12,5 g. Tabák z Jižní čtvrtky obsahuje 10 % nikotinu, tudíž by ho bylo potřeba 125 g. Ještě jsme však nezapočetali účinnost izolace nikotinu (80 %). Pokud tak učiníme, dospějeme k závěru, že je potřeba 156 g tabáku.
- Otrava nikotinem se projevuje nevolností, zvracením, bolestí břicha, průjmem, bolestmi hlavy, pocením a bledostí. Závažnější otravy se projevují závratěmi a slabostí přecházející do křečí, nízkého krevního tlaku a v poslední fázi do komatu. Smrt nastává obvykle v důsledku paralýzy dýchacích svalů a selháním dýchacího ústrojí.
- Nejvíce se nám líbily obrázky Ondřeje Libánského (1) a Julie Hylmarové (2). Co se týče nápadu, stojí zde za zmínku i dílo Kateřiny Znojové (3).

- Vypočítejte, kolik amoniaku se navázalo do roztoku dle titračního stanovení.
- Králíček je živý v případě, že účinnost absorpce NH_3 je vyšší než 90 %. Je králíček v bedně živý? Jaká je účinnost absorpce? Předpokládejte ideální chování plynu.

Přežil králíček únos? Je opravdu nutné před studiem chemického inženýrství absolvovat mateřskou školu? Co tomuto překvapivému zjištění říkají Béd'ovi kolegové? A co na to Jan Tleskač?

- Dokončete příběh.

Řešení úloh 1. série 10. ročníku KSICHTu**Úloha č. 1: Hádanky ve tmě****(8 bodů)**

Autor: Pavel Řezanka

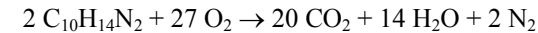
- Původní jméno Gluma byl Smeagol.
1. slovo: GaNdAlF, 2. slovo: ArAgORn, 3. slovo: PIPIn
Všechny 3 postavy patřily do Společenstva prstenu.
- Druhy rýmů jsou postupně: sdružený, střídavý a obkročný.
- Magnet má složení $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, tedy kromě Nd obsahuje železo a bór. Jeho uplatnění v PC je například pro vychylování ramena se čtecí hlavou v harddiscích.
- Sloučenina ArF byla připravena v roce 2000.
- Indium se vyskytuje jako příměs v rudách hliníku.
- Radon vytvoří s kyslíkem sloučeninu RnO_3 .
- Na vyvolání deště se používá jodid stříbrný, který umožňuje vyvolávat mrznutí (heterogenní koagulaci).
- Jedná se o sloučeninu GaP, což je polovodič typu P. GaP se používá při tvorbě fotodiod.

Otázka 1 – 0,5 bodu, 2 – 2,5 bodu, 3 – 0,6 bodu, 4 – 0,4 bodu, 5 – 1 bod, 6 – 0,5 bodu, 7 – 0,5 bodu, 8 – 1 bod, 9 – 1 bod. Celkem 8 bodů.

Úloha č. 2: Dýmkové koření**(8 bodů)**

Autoři: Michal Řezanka a Markéta Zajícová

1. Rovnice spalování nikotinu:



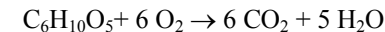
$$M_{\text{nikotin}} = 162,26 \text{ g/mol}$$

$$m_{\text{nikotin}} = 0,1 (10\%) \cdot 5 (\text{hmotnost tabáku}) = 0,5 \text{ g}$$

$$n_{\text{nikotin}} = \frac{m_{\text{nikotin}}}{M_{\text{nikotin}}} = 3,08 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

$$n_1(\text{CO}_2) = \frac{20}{2} (\text{molární zlomek}) \cdot n_{\text{nikotin}} = 3,08 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

Rovnice spalování celulosy (pro názornost budeme počítat pouze s jednou jednotkou polymeru):



$$M_{\text{celulosa}} = 162,14 \text{ g/mol}, M(\text{CO}_2) = 44,01 \text{ g/mol}$$

$$m_{\text{celulosa}} = 0,9 (90\%) \cdot 5 (\text{hmotnost tabáku}) = 4,5 \text{ g}$$

$$n_{\text{celulosa}} = \frac{m_{\text{celulosa}}}{M_{\text{celulosa}}} = 2,78 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

$$n_2(\text{CO}_2) = \frac{6}{1} (\text{molární zlomek}) \cdot n_{\text{celulosa}} = 1,67 \cdot 10^{-1} \text{ mol}$$

$$n(\text{CO}_2) = 365 (\text{rok}) \cdot [n_1(\text{CO}_2) + n_2(\text{CO}_2)] = 72,0 \text{ mol}$$

$$m(\text{CO}_2) = n(\text{CO}_2) \cdot M(\text{CO}_2) = 3,17 \text{ kg}$$

$$t = \frac{m(\text{CO}_2)}{m(\text{CO}_2, \text{ent})} = 6,34 \text{ týdne} = 44,4 \text{ dne}$$

Ent musí kvůli Jetelvědovi fotosyntetizovat 44,4 dne.

- Tabák z Jižní čtvrtky je v náplni obsažen z jedné poloviny, tedy z 5 gramů je to 2,5 gramu tabáku. Ten obsahuje 10 % nikotinu, tedy v celé náplni do vodní dýmky je $m_1 = 2,5 \cdot 0,1 = 250 \text{ mg}$.

