

Autorská řešení 10. ročníku



chemiklání

27. 1. 2025

Úloha A.1 (Jiří Ledvinka, Zuzana Hybnerová): Neúplná

Z kolika Hemiklání se skládá Chemiklání?

Řešení:

Předpona *hemi-* značí jednu polovinu. Chemiklání se tedy skládá ze dvou Hemiklání.

Úloha A.2 (Nathaniel Loh): Jednoduchá molekula

V poslední době se čím dál více mluví o nebinárních identitách. Možná vás však překvapí, že i v chemii můžeme najít sloučeniny, které nazýváme binární. Jak napovídá kořen tohoto slova, jedná se o látky, které obsahují pouze dva druhy atomů. Typickým příkladem binárních sloučenin jsou sloučeniny obsahující jednovazný vodík, který se naváže na druhý atom tolikrát, kolikrát je potřeba: s jednovaznými halogeny tvoří kyseliny HX, s trojvazným dusíkem tvoří amoniak NH_3 , s čtyřvazným uhlíkem methan CH_4 . O něco složitější binární sloučeniny dostaneme, pokud budeme uvažovat dva prvky s vyšší vazností.

Jaká je struktura nejjednodušší molekuly (s nejmenší molekulovou hmotností) obsahující pouze uhlík a dusík bez jiných prvků, která je stabilní za pokojové teploty a standardního tlaku? Všechny atomy v molekule jsou neutrální a bez formálního náboje.

Nápověda: Molekula obsahuje dvě trojné vazby.

Řešení:

Aby byla molekula stabilní, musí být všechny elektrony v molekule spárované, ať už ve vazbách nebo jako volné elektronové páry. Molekula proto musí obsahovat sudý počet elektronů. Jelikož má dusík pět valenčních elektronů a uhlík čtyři, musí být počet atomů dusíku sudé číslo. Nejjednodušší myslitelná molekula CN_2 by musela být cyklická se dvěma dvojnými vazbami v trojčlenném cyklu, a kvůli pnutí v cyklu by zjevně nebyla stabilní. Druhá nejjednodušší molekula je C_2N_2 , kyanogen, a její struktura, $\text{N}=\text{C}-\text{C}=\text{N}$, je jedinou zjevně stabilní možností.

Úloha A.3 (Daniel Čičovský): Ibuprofen

Jedny z nejoblíbenějších léků na bolest jsou s obsahem ibuprofenu. V této úloze se podíváme na světle žluté tablety vyráběné v Praze. Tableta obsahuje kromě účin-

né látky také pomocné složky, které zajišťují její správnou funkci. Chemické látky uvedené níže představují pouze vybrané složky tablety. Přiřadte každé z nich její funkci:

1. mikrokrystalická celulóza (v tabletě cca. 70 %)
 2. sodná sůl kroskarmelózy (v tabletě cca. 3 %)
 3. oxid titaničitý
 4. oxid železitý
- a. rozvolňovadlo (látko usnadňující rozpad tablety)
 - b. žluté barvivo
 - c. plnivo
 - d. bílé barvivo

Řešení:

Na základě znalosti barev sloučenin můžeme rovnou určit, že oxid titaničitý je bílé barvivo a oxid železitý je žluté barvivo. Mikrokrystalická celulóza se běžně používá jako plnivo. Zbývá nám sodná sůl kroskarmelózy, a jediná neobsazená funkce je rozvolňovadlo, které usnadňuje rozpad tablety.

Úloha A.4 (Jiří Ledvinka): ACAB, teda, BCAA

ACAB je zkratka, kterou velmi často používají fotbaloví ultras, aby vyjádřili svou úctu k policii. Protože nás chování fotbalových chuligánů zas tak nezajímá, pojďme se raději podívat na BCAA (z. angl. branched-chain amino acids).

BCAA je skupina aminokyselin obsahujících rozvětvený vedlejší řetězec. Tyto aminokyseliny jsou populárním doplňkem stravy pro sportovce. Přestože do této skupiny patří i některé neproteinogenní aminokyseliny, většina přípravků pro sportovce obsahuje pouze proteinogenní aminokyseliny.

Uveďte tři proteinogenní aminokyseliny, které bychom v BCAA doplňku stravy měli najít.

Řešení:

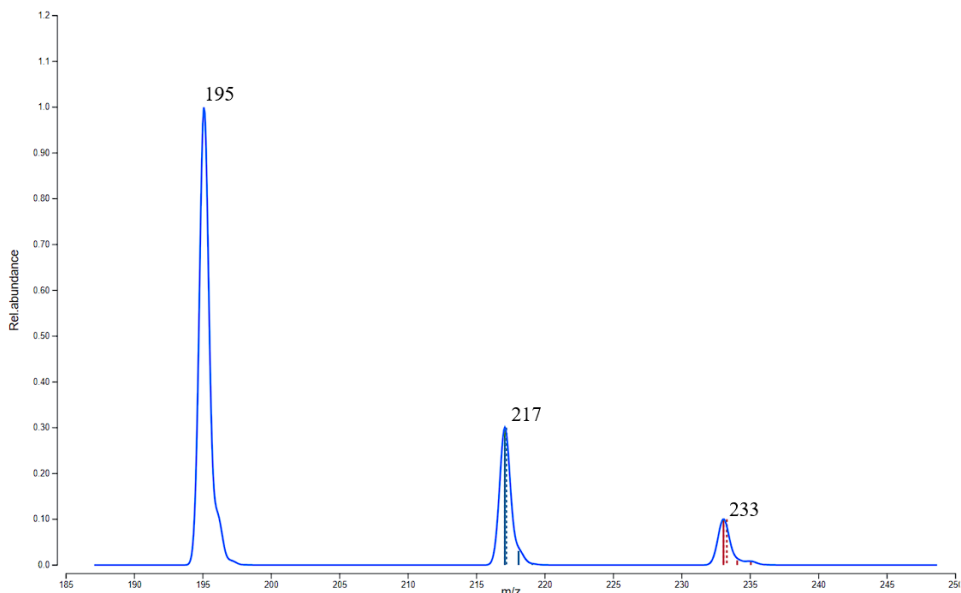
Pokud se podíváme na přehled proteinogenních aminokyselin, v podskupině aminokyselin s hydrofobními řetězci nalezneme tři s rozvětveným vedlejším řetězcem: valin, leucin a isoleucin.

Úloha A.5 (Tadeáš Grabic): Hmotáková

Hmotnostní spektrometrie je instrumentální metoda, která se používá při analýze převážně organických látek. Výstupem analýzy je spektrum, ve kterém jsou zaznamenány intenzity jednotlivých poměrů m/z (hmotnost dělená nábojem). Jednou z nejpožívanějších ionizačních technik je tzv. ESI ionizace, při které vznikají molekulové adukty, a je tedy zaznamenáno m/z celé molekuly s aduktem. V pozitivním módu, tj. ESI+, vznikají adukty analytu s protony $[M+H]^+$, sodným $[M+Na]^+$ a draselným $[M+K]^+$ či například amonným kationtem $[M+NH_4]^+$.

Chemik Tadeáš zkoumal spektrum jedné bioaktivní látky. Spektrum této látky bylo měřeno při ESI+ ionizaci, přičemž dominantní pík ležel na m/z 195. Další píky (byť o menší intenzitě) byly pozorovány na m/z 217 a 233.

Určete molekulovou hmotnost látky, kterou chemik Tadeáš zkoumal, za předpokladu, že náboj každého z iontů (z) je +1.



Řešení:

Vzhledem k použité ionizační technice lze předpokládat vznik aduktů. Nejlehčí pík má m/z 195, což odpovídá aduktu $[M+H]^+$. Ostatním píky se liší o m/z 22, resp. 38, což při nábojích rovným jedné odpovídá aduktům $[M+Na]^+$, resp. $[M+K]^+$. Zbývá

si ještě uvědomit, že ve spektru se neukáže hmotnost molekuly, ale jejich aduktů, takže je nutné od nejllehčího z nich odečíst hmotnost protonu. Správný výsledek tedy je 194.

Úloha A.6 (Pavlína Muchová): Nymphetamine

Kapela *Cradle of Filth* vydala v roce 2004 album *Nymphetamine*. Název je odvozen od nymfomanie a amfetaminu. Jedná se o vysoce návykovou látku se stimulačním účinkem, která se používá i v léčbě ADHD. **Amfetamin** je zkrácený název molekuly alfa-methylfenethylamin (systematicky (*RS*)-1-fenylpropan-2-amin).

Vás nyní čeká jednoduchý úkol: molekulu **amfetaminu** rozpoznat.

Ve výběru máte krom této návykové látky:

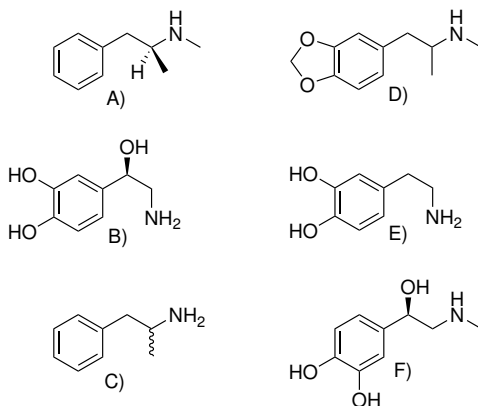
noradrenalin (4-[(1*R*)-2-amino-1-hydroxyethyl]benzen-1,2-diol), jehož hladinu amfetamin zvyšuje, a **adrenalin** ((*R*)-4-(1-hydroxy-2-methylamino)ethyl)benzen-1,2-diol).

Amfetaminy rovněž stimulují receptory pro **dopamin** (3,4-dihydroxyfenethylamin).

Do skupiny amfetaminů patří také:

MDMA neboli extáze (3,4-methylenedioxyamfetamin)

a **metamfetamin** neboli pervitin (1-fenyl-*N*-methylpropan-2-amin).



Řešení:

Zatímco molekuly **B**, **D**, **E** a **F** se vyřadí snadno pouhým objevením kyslíku v jejich názvech (-diol, dihydroxy-, -dioxy-), v případě molekuly **A** je klíčovým vodítkem

v názvu *N*-methyl. Zůstane nám molekula **C**.

Úloha B.1 (Supatpong Juntarawatt): Svítící medvídek

Je rozšířený názor, že látkami s největším obsahem energie jsou výbušniny. To ale vůbec nemusí být pravda! Vždyť kolik energie má v sobě jeden malý gumový medvídek. A když ho hodíte do roztaveného chlorečnanu draselného (KClO_3), tak se ona energie uvolní až pekelně rychle: zasmrdí a zasvítí, a mnohdy se i zkumavka, ve které reakce probíhá, teplem deformuje. Takovýto svítící gumový medvídek je názornou ukázkou silných oxidačních účinků chlorečnanů.

Jednou z reakcí, které se probíhají v reakční směsi, je disproportionace, tedy rozklad chlorečnanu draselného na jiné draselné soli **A** a **B**, ve kterých má atom chloru oxidační čísla -1 a $+7$. Žádné další produkty touto reakcí nevznikají. Napište vyčíslenou rovnici disproportionace chlorečnanu draselného.

Řešení:

KClO_3 disproportionuje na soli **A** a **B**, které obě obsahují draslík, chlor a možná kyslík. Vzhledem k uvedeným oxidačním číslům chloru vychází, že **A** je KCl a **B** je KClO_4 .

Vzhledem k oxidačnímu číslu chloru ($+V$) v KClO_3 je po vyčíslení tato reakce popsaná rovnicí:



Úloha B.2 (Rostislav Huňa): Vzduch ve vzduchu

Jaká je v běžné posluchárně, v níž se pořádá Chemiklání, molární koncentrace vzduchu v mol dm^{-3} ? Uvažujte ideální chování, teplotu 20°C , tlak $100\,000\text{ Pa}$.

Řešení:

Stavová rovnice ideálního plynu:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

Výpočet koncentrace:

$$c = \frac{n}{V} = \frac{p}{R \cdot T} = \frac{100\,000}{8,314 \cdot (20 + 273,15)} \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

Pro výsledek v požadovaných jednotkách je třeba převést jednotky ve jmenovateli, tj. vydělit 1000. Vyjde $0,0413 \text{ mol dm}^{-3}$.

Úloha B.3 (Jiří Ledvinka): Taurin

Taurin (z latinského *taurus* – po první izolaci z býčí žluče) je malá neproteinogenní aminokyselina. Systematickým názvem jde o 2-aminoethansulfonovou kyselinu, tedy chybí zde karboxylová skupina, která je nedílnou součástí všech proteinogenních aminokyselin. Taurin bývá součástí energetických nápojů (až 3 g na 500 ml), byť není pro člověka esenciální látkou, jelikož si ji tělo samo syntetizuje v játrech oxidací a dekarboxylací jedné proteinogenní aminokyseliny. Z jaké proteinogenní aminokyseliny tělo taurin získává?

Řešení:

Jen dvě proteinogenní aminokyseliny obsahují síru: cystein a methionin. Zatímco methionin lze zoxidovat na sulfon ($\text{R-S(=O)}_2\text{-R}'$), cystein jakožto thiol lze snadno oxidovat až na sulfonovou kyselinu. Z cysteinu také zůstanou po dekarboxylaci právě dva uhlíky, kdežto methionin má řetězec o uhlík delší.

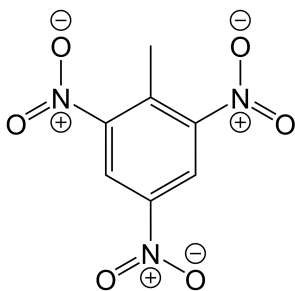
Úloha B.4 (Tadeáš Grabic): T. N. T.

„Cause I'm T. N. T., I'm dynamite
T. N. T., and I'll win the fight
T. N. T., I'm a power load
T. N. T., watch me explode!“

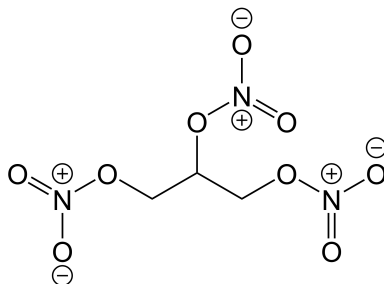
V textu písně *T. N. T.* od australské kapely *AC/DC* se její zpěvák přirovnává k výbušnině. Text evokuje, že výbušninou používanou v dynamitu je zmíněný trinitrotoluen, ovšem není tomu tak. Výbušninou v dynamitu je nitroglycerin, který má ovšem trochu jiné vlastnosti. Mimo jiné se liší také energií uvolněnou při detonaci. Detonační energie trinitrotoluenu činí 950 kJ mol^{-1} a nitroglycerinu 1414 kJ mol^{-1} .

Při návrhu náloží je potřeba, aby uvolnily jen požadované množství energie. Například při trhacích pracích v dolech by mohlo dojít nejen k nežádoucímu nadrolení hlušiny obklopující rudu, ale třeba i k zavalení samotné důlní cesty. Spočítejte proto, jak velký by to mohl být problém, pokud by střelníci špatně pochopili slova zpěváka kapely *AC/DC* Briana Johnsona, který váží 85 kg. O kolik energie více by se uvolnilo, kdyby byl zpěvák tvořen v celé své hmotnosti nitroglycerinem namísto trinitrotoluenu?

Struktury zmiňovaných látek jsou zakresleny níže.



Trinitrotoluen



Nitroglycerin

Řešení:

Nejprve je třeba zjistit ze struktur sloučenin jejich molárních hmotností. Následně určíme z hmotnosti zpěváků látkové množství výbušniny. Jeho vynásobením molární detonační energií dané sloučeniny určíme energii uvolněnou při výbuchu. Požadovaný rozdíl získáme odečtením energie uvolněné při výbuchu trinitrotolueny od energie uvolněné při výbuchu nitroglycerinu.

$$\begin{aligned} n(\text{TNT}) &= m/M = 85\,000/227,13 \\ &= 374,235 \text{ mol} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n(\text{TNG}) &= m/M = 85\,000/227,09 \\ &= 374,3 \text{ mol} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E(\text{TNT}) &= n(\text{TNT}) \cdot E_{\text{mol}}(\text{TNT}) = 374,235 \cdot 950 \\ &= 355\,523,25 \text{ kJ} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E(\text{TNG}) &= n(\text{TNG}) \cdot E_{\text{mol}}(\text{TNG}) = 374,3 \cdot 1414 \\ &= 529\,260,20 \text{ kJ} \end{aligned}$$

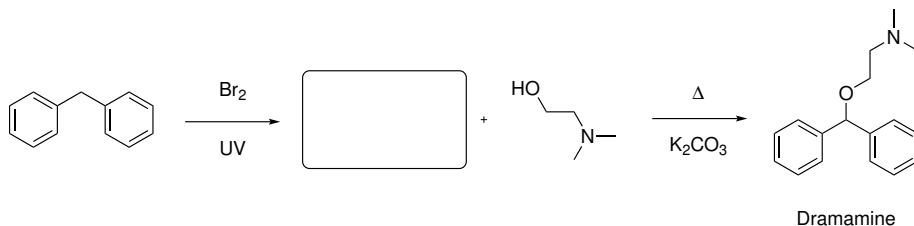
$$\begin{aligned} \Delta E &= E(\text{TNG}) - E(\text{TNT}) = 529\,260,20 - 355\,523,25 \\ &= 173\,736,95 \text{ kJ} \\ &= 173,736 \text{ MJ} \end{aligned}$$

Úloha B.5 (Tatiana Nemirovich): Dramamine

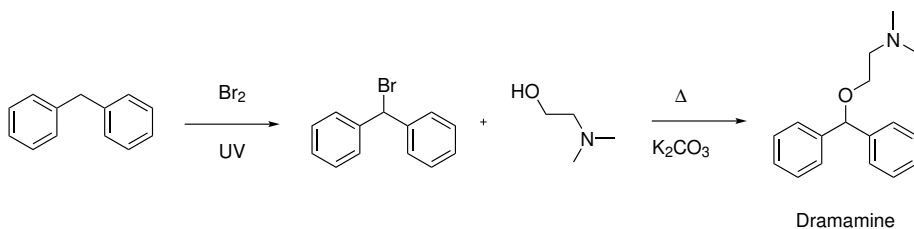
Po měsících plánování jste spolu s kolegou právě dokončili útok na mexický drogový kartel. Adrenalin proudí vašimi žilami, když přeskakujete betonové bariéry a slyšíte výkřiky rozzuřených gangsterů za vámi. Kulky sviští kolem, když se konečně dostanete k přístavu. Tam čeká rychlý člun – vaše jediná cesta ke svobodě. Bez váhání skočíte do lodi a startujete motor. Kolega s pistolí v ruce se připravuje bránit vás před nepřáteli, kteří už jsou nebezpečně blízko.

Ale pak to přijde. Jeho tvář zbledne, ruka se mu začne třást. „Moře... točí se... hlava...“ mumlá a zbraň mu vypadne z ruky. Mořská nemoc. A zrovna teď?! Váš plán na přežití se začne rozpadat. Bez schopného střelce jste ztraceni. Naštěstí jste schopný chemik a máte loď vybavenou provizorní chemickou laboratoří. Vzpomínáte si na komerčně prodávaný lék proti nevolnosti Dramamine, jehož syntézu jste právě našli v hromadě starých papírů. Však rychle si všimnete, že v klíčové části chybí struktura jednoho meziprojektu. Gangsteři jsou už téměř na palubě...

Doplňte strukturu chybějícího meziprojektu **A**, abyste mohli dokončit syntézu léku a bezpečně utéct od mexických gangsterů.



Řešení:



Úloha B.6 (Adam Tywoniak): Molarita v lihovině

Níže najdete báseň ze sbírky *Ožralá Praha* (1951), jejímž autorem je Egon Bondy (1930–2007). Později byla nezávisle zhudebněna skupinami *Plastic People of the Universe* a *Visací zámek*.

Jaká je molární koncentrace mentholu ve Francovce?

Údaj z básně považujte za hmotnostní zlomek.

Menthol je monoterpenoid alkohol se sumárním vzorcem $C_{10}H_{20}O$.

Hustotu Francovky uvažujte $0,86 \text{ g ml}^{-1}$.

Průměrný měsíční příjem v Československu v roce 1951 byl přibližně 4500 korun.

Koupil jsem si Francovku

dal jsem za ni 30 korun
 teď ji vozkusím
 jestli je lepší než rum
 Půl procenta mentolu
 krkám nahoru dolu
 sedmdesát procent lihu
 skládá na mě svoji tíhu
 Koupil jsem si francovku
 je lacinější než rum
 Už mi tím pitím
 měkne rozum

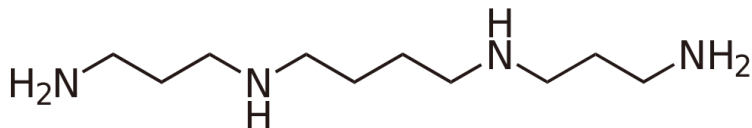
Řešení:

Na základě sumárního vzorce mentholu určíme jeho molární hmotnost 156 g mol^{-1} (přesně $156,269 \text{ g mol}^{-1}$). Molární koncentraci pak vypočteme z hmotnostního zlomku, hustoty a molární hmotnosti:

$$\begin{aligned}
 c &= w \cdot \rho / M \\
 &= 0,005 \cdot 860 / 156,269 \\
 &= 0,02752 \text{ mol dm}^{-3} \\
 &= 27,52 \text{ mmol dm}^{-3}
 \end{aligned}$$

Úloha C.1 (Jiří Ledvinka): Spermin

Spermin (zobrazený níže) je jeden z polyaminů nacházejících se ve spermatu, které je díky tomu bazické.



Představte si pro tuto úlohu, že se spermin ocitne v kyselém prostředí. Jaký bude náboj této molekuly? Disociace konjugovaných kyselin jsou popsány těmito dekadickými logaritmy konstant acidity:

$$pK_{a,1} = 7,96; pK_{a,2} = 8,85; pK_{a,3} = 10,02; pK_{a,4} = 10,80$$

Řešení:

Hodnota pK_a popisuje disociaci kyseliny, v tomto případě konjugované kyseliny – tedy protonovaného aminu. Je definována jako záporně vzatý dekadický logaritmus rovnovážné konstanty K_a :

$$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

Z definice této konstanty jde odvodit Hendersonovu–Hasselbalchovu rovnici:

$$pH = pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$$

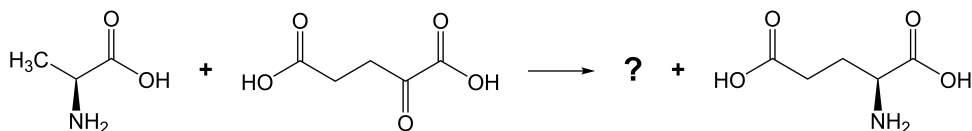
Z té bez jakéhokoliv počítání vidíme, co se o kyselinách běžně učí – pokud je pH vyšší než pK_a , převažuje deprotonovaná forma, při $pH < pK_a$ zase převažuje protonovaná forma. Spermin jakožto bazický amin tak v kyselém prostředí podléhá úplné protonaci, takže v něm bude převažovat jeho forma s nábojem +4.

Úloha C.2 (Zuzana Zápotocká): Jaterní testy

Zkušenému chemikovi Ondřejovi se po vyčerpávajících životních zkouškách splnil sen a nastoupil do své vysněné laboratoře. Ale než se mohl plně pohroužit do práce,

čekaly ho ještě poslední testy – testy, které měly ověřit, zda je na takové úrovni, kterou tato instituce vyžaduje. Přestože měl za sebou hodně, tyto testy se ukázaly být nejtěžší zkouškou jeho života. Když konečně obdržel výsledky testů, orosil se. Nesplnil je. Důvodem jeho neúspěchu byly dvě slova, zářící nyní červeně na papíře s výsledky: ALT a AST.

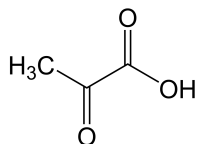
Jak jste už nepochybně pochopili, Ondřejovou životní zkouškou se staly jaterní testy. Mezi některé markery, které sledují, patří právě enzymy ALT (alaninaminotransferáza) a AST (aspartátaminotransferáza), které bývají zvýšené v případě poškození jater. Vaším úkolem je doplnit produkt reakce níže, kterou katalyzuje právě enzym ALT.



Ondřejovi naštěstí byla dána druhá šance. Tak snad se příště na jaterní testy poctivě naučí.

Řešení:

Během reakce dochází k transaminaci za vzniku kyseliny pyrohroznové (v organismu se nachází spíše v deprotonované formě, pyruvátu).



Úloha C.3 (Neil Waterson): Nenázvuhodná sloučenina

$\text{AuXe}_4(\text{Sb}_2\text{F}_{11})_2$ je neobvyklá sloučenina obsahující vazbu mezi vzácným plynem a vzácným kovem. Uveďte oxidační stavy Au, Xe a F. Předpokládejte, že všechny prvky mají celočíselné oxidační stavy, a všechny atomy jednoho prvku mají stejný oxidační stav.

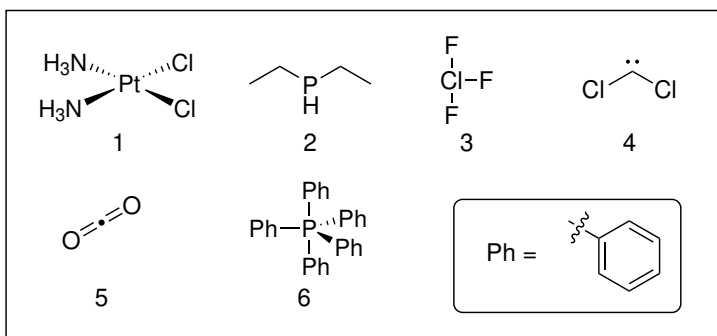
Řešení:

Fluor musí mít oxidační stav $-I$. Celý anion tak má náboj $1-$. Kation $AuXe_4$ má tedy náboj $2+$, z čehož vyplývá oxidační číslo zlata II a xenonu 0 .

Úloha C.4 (Štěpán Novák): VSEPR

Teorie odpuzování elektronů valenční sféry (VSEPR) je model používaný k předpovědi geometrie molekul. Přiřadte následujícím molekulám jejich odpovídající tvary:

- | | |
|---|--------------------------|
| 1) <i>cis</i> - $[Pt(NH_3)_2Cl_2]$ (cisplatina) | a) čtvercový |
| 2) diethylfosfin | b) trigonální pyramida |
| 3) ClF_3 | c) tvar T |
| 4) Dichlorkarben | d) lomený |
| 5) CO_2 | e) lineární |
| 6) PPh_5 | f) trigonální bipyramida |

**Řešení:**

cis- $[Pt(NH_3)_2Cl_2]$ má centrální atom platiny se čtyřmi ligandy, a má tedy čtvercovou geometrii. Tetraedrická geometrie jednak není v seznamu, a za druhé má platina konfiguraci d^8 , a kvůli tomu preferuje uspořádání ligandů v jedné rovině (tzv. čtvercovou planární geometrii).

V diethylfosfinu je centrálním atomem fosfor, který je spojen se dvěma ethylovými skupinami a jedním atomem vodíku. Díky ne vazebnému elektronovému páru na fosforu má molekula tvar trigonální pyramidy.

V ClF_3 je centrálním atomem chlor, kolem kterého jsou tři atomy fluoru a dva ne vazebné páry elektronů. Dohromady vytváří tvar T.

Dichlorkarben (CCl_2) má atom uhlíku spojený se dvěma atomy chloru. Kvůli volnému elektronovému páru na uhlíku má molekula lomený tvar.

Oxid uhličitý je lineární molekula, protože uhlík je spojen se dvěma atomy kyslíku dvojnými vazbami a nemá žádné nevazebné páry.

V PPh_5 je centrálním atomem fosfor spojený s pěti fenylovými skupinami a molekula má tvar trigonální bipyramidy.

Úloha C.5 (Supatpong Juntarawatt): Mexická

Mexičané tradičně zvyšují nutriční hodnoty sklizených kukuřičných zrn nixtamalizací. Tento proces se provádí vařením zrn v alkalickém prostředí (například ve vápenné vodě, $\text{Ca}(\text{OH})_2$). Nakonec se získá kukuřičné těsto nebo nixtamalizovaná kukuřičná mouka, která je základem mnoha mexických receptů.

Agent FE0000 by chtěl zbytky roztoku vápenné vody zvané nejayote zlikvidovat; je si však vědom toho, že přilévání Ca^{2+} do vodních zdrojů zvyšuje tvrdost vody. Proto chce stanovit koncentraci Ca^{2+} v nejayote pomocí titrace standardizovaným roztokem kyseliny ethylendiamintetraoctové (EDTA) na indikátor Eriochromová čern T.

Je známo, že komplexační reakce mezi Ca^{2+} a EDTA probíhá v molárním poměru 1:1. Vypočítejte koncentraci Ca^{2+} v g l^{-1} , jestliže se k titraci 25,00 ml nejayote použije 42,50 ml roztoku EDTA o koncentraci 0,10 mol dm^{-3} .

Řešení:

Látkové množství EDTA použité k titraci odpovídá látkovému množství Ca^{2+} obsaženému v 25,00 ml nejayote. Látková koncentrace Ca^{2+} je tedy

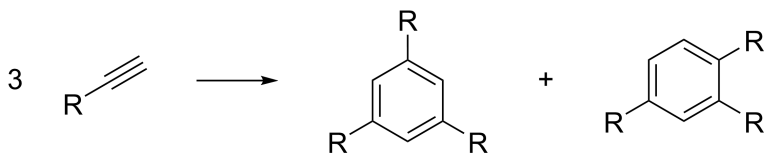
$$c_{\text{Ca}^{2+}} = \frac{c_{\text{EDTA}} \cdot V_{\text{EDTA}}}{V_{\text{Ca}^{2+}}} = \frac{42,50 \text{ ml} \times 0,10 \text{ mol dm}^{-3}}{25,00 \text{ ml}} = 0,170 \text{ mol dm}^{-3}$$

Hmotnostní koncentrace Ca^{2+} v nejayote potom je

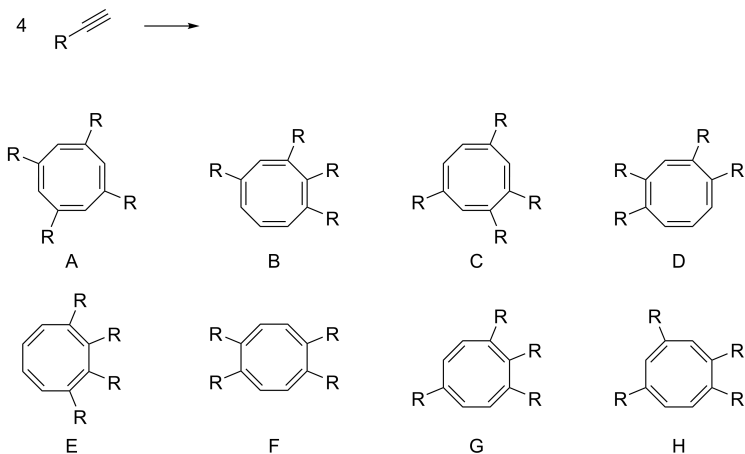
$$\rho = c \cdot M = 0,170 \text{ mol dm}^{-3} \times 40,08 \text{ g mol}^{-1} = 6,81 \text{ g l}^{-1}$$

Úloha C.6 (Jan Hruběš): Mechanochemie

Mechanochemie je mladým, rozvíjejícím se odvětvím chemie. Mechanochemické reakce probíhají za sucha, bez přítomnosti rozpouštědel. Práškové reaktanty se pak spolu rozemelou za pomoci kovových kuliček, například ze zinku nebo niklu. Touto cestou vznikají nečekané produkty – některé produkty, které při mechanochemických reakcích vznikají, by v roztoku vůbec nevznikly. Zároveň je mechanochemie environmentálně přívětivá – není třeba používat toxická rozpouštědla s vysokou environmentální stopou. Proto se v současnosti mechanochemii věnují mnohé výzkumné týmy. Jednou takovou reakcí je i pericyklická kondenzace alkyňů. V roztoku je jejím známým produktem benzenové jádro vzniklé cyklizací tří trojných vazeb. Níže vidíte příklady dvou produktů, které mohou vzniknout cyklizací tří terminálních alkyňů.



Mechanochemicky však cyklizací čtyř trojných vazeb vzniká osmičlenný antiaromatický kruh. Z následujících osmi molekul vyberte ty, které by mohly vzniknout mechanochemickou kondenzací čtyř jednotek terminálního alkyňu.

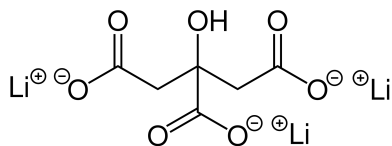


Řešení:**A, C, F, H**

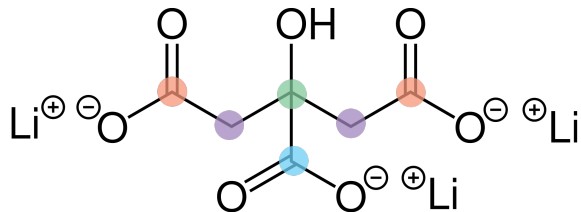
Při úvaze, které produkty jsou reálné, musíme vycházet z toho, jak je možné naorientovat výchozí molekuly terminálního alkynu. Není tedy reálný vznik 1,2,3,4- nebo 1,3,4,5-tetrasubstituovaného kruhu, protože neexistuje žádné takové uspořádání čtyř molekul alkynu, jehož cyklizací by vznikl. Stejně tak nemůže vzniknout uspořádání obsahující $-(\text{CH})_3-$. Naopak např. 1,2,5,6-tetrasubstituovaný kruh cyklizací vhodně orientovaných alkynů vzniknout může.

Úloha D.1 (Tatiana Nemirovich): Bipolární

Stejně jako kokain v Coca-Cole bylo lithium široce propagováno jako jeden z mnoha patentovaných léčivých přípravků, populárních na konci 19. a začátku 20. století, a bylo léčivou složkou osvěžujícího nápoje, ovšem jiného. Charles Leiper Grigg, zakladatel společnosti *The Howdy Corporation*, vynalezl v roce 1920 recepturu na citronově-limetkový nealkoholický nápoj. Produkt, původně nazvaný „Bib-Label Lithiated Lemon-Lime Soda“, byl uveden na trh v roce 1929 a obsahoval stabilizátor nálady citronan lithný. Jeho název byl brzy změněn na „7 Up“. Nápoj byl patentovaným léčivem propagovaným jako lék proti kocovině. Citronan lithný byl ze složení 7 Up vyrazen v roce 1948 poté, co byl zakázán Úřadem pro kontrolu potravin a léčiv. Kolik píků najdeme v uhlíkovém NMR spektru citrátu lithného? Každé chemicky neekvivalentní jádro poskytne rozdílný signál.

**Řešení:**

Molekula má celkem šest atomů uhlíku, ovšem vzhledem k symetrii jsou z nich dva páry ekvivalentní. Zbudou čtyři neekvivalentní uhlíky, v uhlíkovém spektru nukleární magnetické rezonance proto budou čtyři signály. Neekvivalentní uhlíky jsou barevně vyznačeny na obrázku.



Úloha D.2 (Štěpán Novák): Viktor Meyer

V laboratorní skříni s chemikáliemi se vám po dlouhé době skladování rozpadla etiketa na jedné lahvi a nyní nevíte, jaká látka v ní je. Bohužel jste dlouhodobě nedostatečně financováni a tudíž nemáte přístup k přístrojům pro NMR nebo GC-MS/LC-MS analýzu. V laboratoři jste však našli starší aparaturu pro stanovení molární hmotnosti metodou Viktora Meyera. Metoda spočívá v tom, že v plynotěsné aparatuře s vyrovnávačem tlaku odpaříte známé množství vzorku. Výsledné páry poté vytlačí vzduch z prostoru aparatury do připojené plynové byrety, kde po vyrovnání tlaků odečtete objem par látky. Vzorek se do aparatury vkládá v zatavené ampuli bez bublinek, která je následně shozena do pícky, kde dochází k roztržení ampule a uvolnění vzorku. Provedli jste tři měření, která jsou zaznamenaná v tabulce. Na základě platnosti stavové rovnice ideálního plynu určete molární hmotnost neznámé látky.

	$T = 23,5\text{ }^{\circ}\text{C}$	$p = 101\,325\text{ Pa}$	$R = 8,314\text{ J/K/mol}$
Vzorek	Hmotnost ampule	Hmotnost plné ampule	Objem v byretě
1	84,6 mg	204,6 mg	31,7 ml
2	96,2 mg	205,6 mg	28,9 ml
3	136,5 mg	308,4 mg	45,4 ml

Řešení:

Za použití

$$pV = nRT \text{ a vzorec } n = \frac{m}{M}$$

dostaneme úpravou vzorec:

$$M = \frac{mRT}{pV}$$

Hmotnost vzorku dostaneme odečtením hmotnosti prázdné ampule od hmotnosti plné ampule. Pro výpočet tedy máme:

$$M = \frac{(m_2 - m_1)RT}{pV}$$

Dosazením dat z tabulky hodnot dostáváme řešení. U řešení by nemělo docházet k chybám ze zaokrouhlení.

Vzorek	Molární hmotnosti	Průměr
1	92,142	92,149
2	92,142	Směrodatná odchylka
3	92,163	0,01

Úloha D.3 (Alexandros Terzopoulos): Eutektikum

V učebnicích se dočtete, že jediným kapalným kovem za pokojové teploty je rtuť, která se dříve používala jako náplň do přesných teploměrů. Dnes už máme teploměry digitální, případně v nich je poměrně nebezpečná rtuť nahrazena o něco bezpečnějšími tekutými slitinami gallia.

Gallium ale není jediným kovem, který tvoří za pokojové teploty kapalnou slitinu. Sodík a draslík, alkalické kovy, které jsou při pokojové teplotě v pevném stavu, tvoří při správném poměru vysoce reaktivní kapalnou slitinu známou jako “NaK”. Jedná se o příklad eutektického systému, tj. homogenní směsi, která má nižší teplotu tání než jednotlivé složky. Méně známá eutektická slitina alkalických kovů s velmi nízkou teplotou tání $-37,5^\circ\text{C}$ má vzorec $\text{Cs}_{77}\text{K}_{23}$.

Kovové cesium se historicky získával elektrolýzou kyanidu cesného podle rovnice:



Vypočítejte, jak dlouho (v hodinách) musí probíhat elektrolýza při proudu 10 A, aby se získalo dostatečné množství cesia pro vytvoření výše zmíněné eutektické slitiny při reakci s 250 g draslíku. Předpokládejte, že reakce probíhá s 100 % účinností.

Řešení:

Jde o stechiometrický výpočet záměrně zamlžený dodatečnými informacemi, kde musíte rozpoznat, co je pro řešení podstatné.

Máme 250 g kovového draslíku, což představuje látkové množství $\frac{250}{39,1} = 6,40$ mol. Z něj vznikne $\frac{6,40}{23} = 0,278$ mol eutektika.

Na jeho přípravu je třeba $77 \times 0,278 = 21,4$ mol cesia, a tedy také 21,4 mol prekursoru CsCN.

Pomocí Faradayova zákona pro 21,4 mol a proud 10 A určíme potřebný čas 57,37 h.

Úloha D.4 (Jiří Ledvinka): Kolová

Klasická Coca-Cola má pH 2,37, pro srovnání: 8% ocet má pH přibližně 2,6. Coca-Cola je tedy kyselější než ocet běžně používaný k odstraňování vodního kamene. Za pH Coca-coly odpovídá pouze kyselina fosforečná, která je trojsytnou kyselinou s $pK_{a,1} = 2,14$, $pK_{a,2} = 7,20$, a $pK_{a,3} = 12,37$. Spočítejte hmotnostní koncentraci této kyseliny v Coca-Cole.

Řešení:

Definice konstanty acidity:

$$K_{a,1} = [\text{H}^+] \times \frac{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]}{[\text{H}_3\text{PO}_4]}$$

Látková bilance:

$$c = [\text{H}_2\text{PO}_4^-] + [\text{H}_3\text{PO}_4]$$

Zachování elektroneutrality:

$$[\text{H}^+] = [\text{H}_2\text{PO}_4^-]$$

Potom

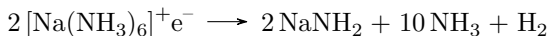
$$c = [\text{H}^+] + \frac{[\text{H}^+]^2}{K_{a,1}} = 10^{-2,37} + \frac{(10^{-2,37})^2}{10^{-2,14}} = 0,0068 \text{ mol}/\ell$$

$$\rho = c \cdot M = 0,0068 \times 98 = 0,66 \text{ g}/\ell$$

Další stupeň disociace lze zanedbat, jelikož je o 5 řádů dál.

Úloha D.5 (Neil Waterson): Elektridy

Elektridy jsou sloučeniny, v nichž elektron působí jako anion, tzv. solvatovaný elektron. Příkladem je $[\text{Na}(\text{NH}_3)_6]^+e^-$. Tato sloučenina se může rozkládat redoxní reakcí na tři produkty. Napište vyčíslenou rovnici rozkladu $[\text{Na}(\text{NH}_3)_6]^+e^-$.

Řešení:

Solvatovaný elektron může redukovat amoniak za vzniku amidu sodného. Proto musí vzniknout také vodík.

Úloha D.6 (Jiří Ledvinka): Angela

Na začátku září 2024 se v Dolním Sasku vyskytly komplikace v lokální dopravě, neboť pro nově zavedené vodíkové vlaky v rámci Energiewende došel vodík. Dodavatel přislíbil do týdne zjednat nápravu. Aby místní vláda předešla motoristickému povstání Turků, ujala se situaci rychle řešit. Jelikož všichni němečtí chemičtí velikáni jako Fritz Haber, Carl Bosch nebo Carl von Linde jsou již šest stop (183 cm) pod zemí, bylo nutné povolát někoho mladšího. A tak přišla řada na známou berlínskou chemičku v důchodu, Angelu Merkel. Ta se před svou politickou kariérou věnovala teoretické chemii, a tak si bohužel vzpomněla, jen jak na gymnáziu připravovali vodík rozpouštěním zinku v kyselině chlorovodíkové.

Pojďme si sepsat, jaký úkol tedy před Angelou stojí. Je potřeba pokrýt týdenní spotřebu vodíku 14 jednotek *iLint*, které jsou poháněné elektrickou energií generovanou palivovým článkem právě z vodíku. Každá jednotka má nádrž na 1800 kg vodíku s dojezdovou vzdáleností přibližně 1175 km. Týdenní oběh jednotky je přibližně 5000 km, maximální rychlosti 140 km/h. Kolik tun zinku bude Angela potřebovat? Jelikož je Angela teoretická chemička, předpokládejte, že je výtěžek její reakce 100 %.

Řešení:

První nápověda:

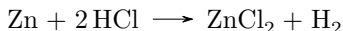
$$\text{Spotřeba} = \frac{\text{objem nádrže}}{\text{dojezd}} [\text{kg km}^{-1}]$$

Nejprve spočteme, kolik budeme potřebovat vodíku. Spotřeba jednotky je $1800 \text{ kg}(\text{H}_2)/1175 \text{ km}$. Za týden tedy jedna jednotka spotřebuje

$$m(\text{H}_2) = \frac{5000}{1175} \times 1800 \text{ kg} = 7659,57 \text{ kg}$$

Všech čtrnáct jednotek tedy projedí 107,2 tuny vodíku.

Angela bude tento vodík vyrábět podle rovnice:



Zinku bude tedy potřeba:

$$m(\text{Zn}) = \frac{M(\text{Zn})}{M(\text{H}_2)} \times m(\text{H}_2) = \frac{65,38}{2,02} \times 107,2 \text{ t} = 3470 \text{ t}$$

Úloha E.1 (Tatiana Nemirovich): Lanýžová

Sírné sloučeniny patří ke skupině látek s velmi charakteristickým nepříjemným zápachem, který člověk dokáže ucítit již v koncentraci 10 ppb (molárních).

Chemik Š. cestou z laboratoře omylem vylil malé množství dithiapentanu (systemicky: bis(methylsulfanyl)methan; hustota = 1,059 g/cm³) v obytné místnosti o rozměrech 3 × 4 × 2,5 m. Za předpokladu že vylitá látka vytvořila louži, jejíž tvar můžeme aproximovat kruhem o tloušťce 100 μm, a která se následně zcela vypařila do vzduchu, spočítejte maximální poloměr vzniklé louže (v cm), jejíž výpar osoby v místnosti ještě nepocítí.

Vzduch aproximuje ideálním plynem o teplotě 25 °C a tlaku 101 325 Pa.

Řešení:

Objem místnosti je 3 × 4 × 2,5 = 30 m³. Využijeme stavovou rovnici ideálního plynu:

$$pV = nRT \quad \Rightarrow \quad n_{\text{vzduch}} = \frac{pV}{RT}$$

Dosadíme:

$$n_{\text{vzduch}} = \frac{101325 \times 30}{8,314 \times 298} \approx 1225,5 \text{ mol.}$$

Maximální koncentrace dithiapentanu:

$$n_{\text{dithiapentan}} = \frac{10}{10^9} \times 1225,5 = 1,2255 \times 10^{-5} \text{ mol.}$$

Hmotnost dithiapentanu:

$$m_{\text{dithiapentan}} = 1,2255 \times 10^{-5} \times 108 \approx 1,326 \times 10^{-3} \text{ g.}$$

Objem látky určíme z její hustoty:

$$V_{\text{dithiapentán}} = \frac{1,326 \times 10^{-3}}{1,059} \approx 1,25 \times 10^{-3} \text{ cm}^3.$$

Objem kruhové louže je dán vztahem:

$$V_{\text{louže}} = \pi r^2 d,$$

kde $d = 0,01$ cm. Vyjádříme poloměr r :

$$r = \sqrt{\frac{V_{\text{louže}}}{\pi d}}.$$

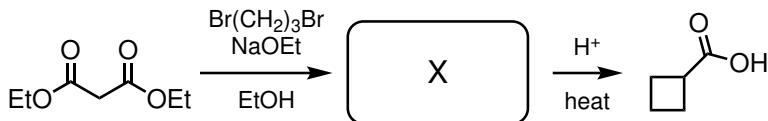
Dosadíme:

$$r = \sqrt{\frac{1,25 \times 10^{-3}}{\pi \times 0,01}} \approx 0,2 \text{ cm}.$$

Maximální poloměr louže, při kterém zápach nebude detekován, je přibližně 0,2 cm.

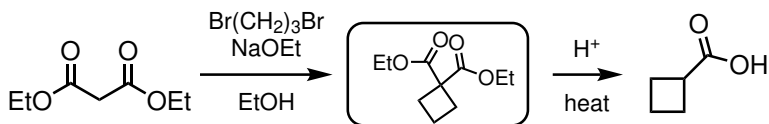
Úloha E.2 (Štěpán Novák): Krabicová

Jelikož je pro tuto soutěž syntéza barbituratů dle názoru ostatních autorů příliš náročná (avšak studenti by ji zajisté zvládli, že?), rozhodli jsme se pro syntézu kyseliny cyklobutankarboxylové. Využívá stejnou klíčovou reakci, kterou znalý chemik rozpozná jako malonesterovou syntézu. V té se využívá relativní kyselosti alfa vodíků diethylmalonátu, které mají pK_a okolo 13,5. Díky tomu se dá využít i slabších bazí pro deprotonaci a následnou substituci. Vaším úkolem bude nakreslit cyklickou látku **X**, která po kyselé hydrolyze termicky dekarboxyluje a poskytuje námi chtěnou kyselinu cyklobutankarboxylovou.

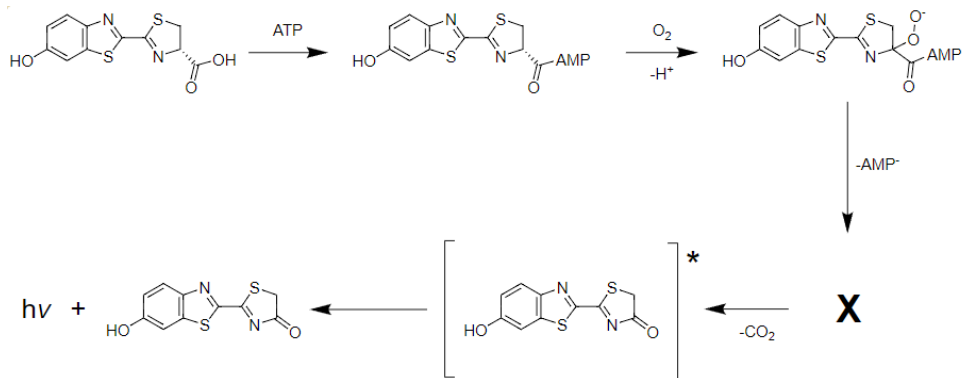
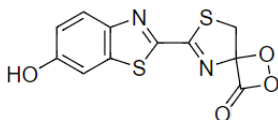


Řešení:

Dvojitá nukleofilní substituce vzniká diethyl cyklobutan-1,1-dikarboxylát.

**Úloha E.3 (Jakub Sochor): Luciferiny**

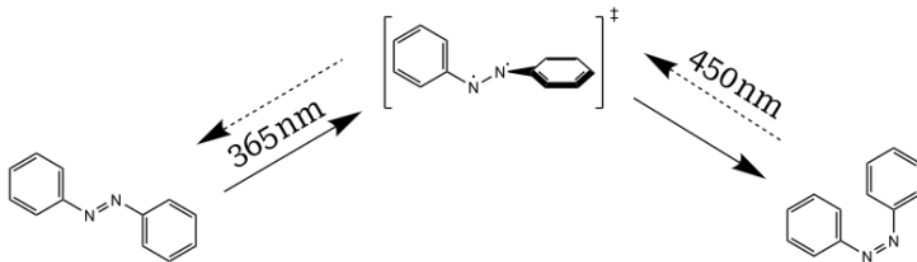
Luciferiny jsou skupina látek umožňujících bioluminiscenci. Jedná se o malé molekuly, které v přítomnosti enzymů ze třídy luciferáz podstupují oxidaci vzdušným kyslíkem a následně uvolňují chemickou energii formou světla. Na schématu je znázorněn princip luminiscence luciferinu světlušky. Prvním krokem je fosforylace karboxylové kyseliny, následuje oxidace molekulárním kyslíkem na α -uhlíku a intramolekulární acylová substituce za vzniku intermediátu **X**. Ten ztrácí oxid uhlíčitý a přechází na excitovaný produkt, který vyzáří foton při návratu na základní energetickou hladinu. Nakreslete strukturu látky **X**, pokud víte, že obsahuje čtyřčlenný cyklus.

**Řešení:**

Vzniká nestabilní 1,2-dioxetan.

Úloha E.4 (Jakub Sochor): Azobenzen

Azobenzen je dobře prozkoumaná molekula, jejíž deriváty mohou sloužit jako molekulární spínače. Funkci spínače zajišťuje fotochemická změna konfigurace na dvojné vazbě z *E*- na *Z*- a naopak. Vlnová délka světla potřebného pro přeměnu *E*-azobenzenu na *Z*-azobenzen je 365 nm. Opačný děj probíhá pod viditelným světlem (450 nm). Pomocí vztahu pro energii fotonu $E = h \cdot \frac{c}{\lambda}$ vypočítejte přibližnou změnu Gibbsovy energie pro izomerizaci *E*-azobenzenu na *Z*-azobenzen v kJ mol^{-1} . Předpokládejme, že nedochází ke ztrátám energie.



Řešení:

Pro vyřešení nám stačí odečíst od sebe energie uvedených dějů a vše správně vztáhnout na 1 mol částic. Dosadíme do rovnic pro energie:

$$E_{E \rightarrow Z} = \frac{h \cdot c}{365 \times 10^{-9}} \approx 5,4426 \times 10^{-19} \text{ J},$$

$$E_{Z \rightarrow E} = \frac{h \cdot c}{450 \times 10^{-9}} \approx 4,4143 \times 10^{-19} \text{ J}.$$

Pro změnu Gibbsovy energie platí:

$$\Delta G = E_{E \rightarrow Z} - E_{Z \rightarrow E} \approx 1,02799 \times 10^{-19} \text{ J}.$$

Přepočteno na požadované jednotky:

$$\Delta G(\text{kJ mol}^{-1}) = \Delta G(\text{J}) \cdot N_A \cdot 10^{-3} = 1,0280 \times 10^{-19} \times 6,0221 \times 10^{23} \times 10^{-3} \approx 61,91 \text{ kJ mol}^{-1}.$$

Přibližná změna Gibbsovy energie pro izomerizaci *E*-azobenzenu na *Z*-azobenzen je $61,91 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Úloha E.5 (Nathaniel Loh): Borany

Oktetové pravidlo je empirická pomůcka, která nám pomáhá určit, jaké molekuly by mohly existovat a jaké ne. Za stabilní se podle oktetového pravidla považuje molekula, jejíž všechny atomy mají ve svém širokém okolí osm elektronů (případně dva, pokud se jedná o vodík). A co je to široké okolí? To zahrnuje veškeré elektrony, které se nacházejí jak v atomových, tak v molekulových orbitalech daného atomu.

Pro některé molekuly je však oktetové pravidlo poněkud nepoužitelné. Jedním z typických příkladů jsou borany, sloučeniny vodíku a boru. Vzhledem k tomu, že bor má jen tři valenční elektrony, měl by být podle klasické teorie valenční vazby pouze trojvazný. Jenže široce rozšířená teorie o tom, že chemická vazba vzniká spojením dvou nepárových elektronů u dvou různých atomů, jednoduše není úplně pravdivá.

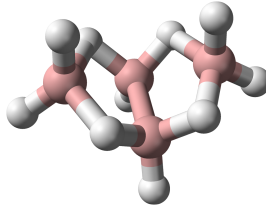
V molekulách boranů existují třířředové dvouelektronové (3c-2e) vazby mezi dvěma atomy boru a jedním atomem vodíku. Ty vzniknou kombinací atomových orbitalů na všech třech atomech, dochází však ke vzájemnému sdílení jenom dvou elektronů. Tím dojde k úspoře elektronů, bor se může účastnit další vazebné interakce a jeho široké okolí, do něhož se počítají oba elektrony z třířředové dvouelektronové vazby, bude obsahovat osm elektronů přesně tak, jak si to představujeme pomocí oktetového pravidla.

Určete, kolik třířředových dvouelektronových vazeb B–H–B se nachází v molekule se vzorcem B_4H_{10} .

Řešení:

Bor má 3 valenční elektrony a vodík 1, takže celkový počet valenčních elektronů v molekule je $3 \times 4 + 1 \times 10 = 22$. Bor potřebuje 8 elektronů, aby měl plnou valenční slupku, vodík potřebuje 2, takže celkový počet potřebných efektivních valenčních elektronů je $8 \times 4 + 2 \times 10 = 52$.

Pokud se 22 dostupných elektronů rozdělí mezi 2 atomy vždy ve vazbách (2c-2e), dostaneme, že efektivních valenčních elektronů bude 44, což je o 8 méně, než je potřeba. Proto musí být 8 elektronů sdíleno mezi 3 atomy ve vazbách (3c-2e), což znamená, že v B_4H_{10} jsou 4 tyto vazby. Struktura B_4H_{10} , nazývaného tetraboran(10), je znázorněna níže.



Úloha E.6 (Stanislav Chvíla): Kaolín

V továrně na plavený kaolín se v pondělí ráno před náběhem linky testuje těsnost filtračního zařízení pro záchyt nečistot. Z minulé zkoušky zůstalo v zásobní nádrži 180 litrů suspenze kaolínu o hustotě $1,025 \text{ g cm}^{-3}$ a hmotnostním zlomku kaolínu 0,053. Do ní bylo za intenzivního míchání přidáno 50 ℓ vody a 2 kg suchého kaolínu, důkladně rozmícháno, a poté byla jedna třetina objemu suspenze filtrována přes plachetku. Po filtraci byl zvážen mokrá filtrační koláč, jeho hmotnost byla 5,374 kg a podíl pevných částic v koláči 71,1 hmotnostních procent.

Stanovte filtrační účinnost plachetky v zařízení, aneb podíl pevných částic, které plachetka zachytila. (Inženýrsky považujte objemy za zcela aditivní.)

Řešení:

Před spuštěním zkoušky těsnosti je ve vsádce přítomen kaolín z minulé zkoušky o hmotnosti

$$m_{\text{zbyl}} = \rho_{\text{zbyl}} V_{\text{zbyl}} w_{\text{zbyl}} = 1,025 \times 180 \times 0,053 = 9,7785 \text{ kg}$$

Po přidání a homogenizaci vsádky byla zfiltrována jedna třetina hmotnosti

$$m_{\text{přivedeno}} = \frac{1}{3} \times (m_{\text{zbyl}} + m_{\text{přidáno}}) = \frac{1}{3} \times (9,7785 + 2) = 3,9216 \text{ kg}$$

Ve filtračním koláči je přítomno

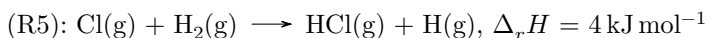
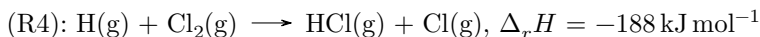
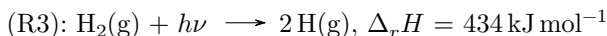
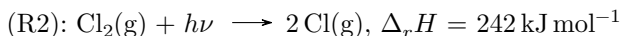
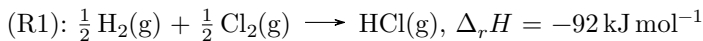
$$m_{\text{zachyceno}} = m_{\text{koláč}} \cdot w_{\text{koláč}} = 5,374 \times 0,711 = 3,8209 \text{ kg}$$

a tím pádem je filtrační účinnost

$$\phi = \frac{m_{\text{zachyceno}}}{m_{\text{přivedeno}}} \times 100 \% = \frac{3,8209}{3,9216} \times 100 \% = 97,32 \%$$

Úloha F.1 (Vojtěch Laitl): Fotochemie

Fotochemie využívá záření ke katalýze nebo iniciaci různých chemických reakcí. Známým příkladem takovéto reakce je syntéza chlorovodíku z prvků. Reakce, které mohou být zapojeny do tohoto procesu, a jejich standardní entalpie jsou uvedeny níže.



Syntéza probíhá ve třech elementárních krocích, jimiž jsou iniciace zářením a postupný vznik dvou molekul HCl. Vyberte tyto kroky z reakcí (R1)–(R5) výše a запиšte je ve správném pořadí. Iniciační fotony odpovídají modrému světlu, tedy vlnové délce 450 nm.

Řešení:

Modré světlo nese energii odpovídající entalpii

$$\Delta H = N_A \frac{hc}{\lambda} = 6,022 \times 10^{23} \times \frac{6,626 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{450 \times 10^{-9}} \doteq 265\,800 \text{ J mol}^{-1}.$$

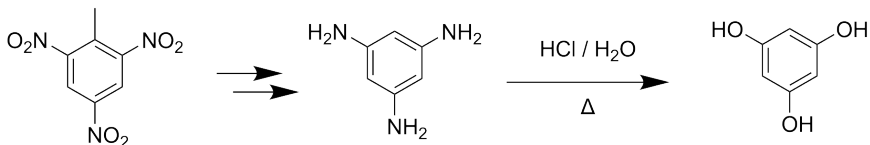
Na rozbití vazby H–H (R3) tato energie nestačí, proces tedy musí začít štěpením Cl_2 . Vzniklý radikál chloru je nestabilní a atakuje vodík za vzniku první molekuly HCl (R5). Vedlejším produktem je vodíkový radikál, který rekombinuje s další molekulou Cl_2 za vzniku druhého ekvivalentu produktu (R4).

Reakce (R1) není elementárním krokem. Jde pouze o přepsanou sumární rovnici, a pro řešení tedy není potřeba.

Úloha F.2 (Jakub Sochor): Floroglucinol

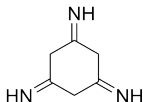
Floroglucinol, neboli benzen-1,3,5-triol, je organická sloučenina s širokým uplatněním v syntéze léčiv a výbušnin. V přírodě se, stejně jako řada dalších fenolických látek, objevuje ve strukturách tříslovin (taninů). Floroglucinol má spasmolytické účinky, používá se proti ledvinové kolice a svalovým křečím gastrointestinálního traktu.

Na obrázku je jedna z možných příprav této látky vycházející z dobře dostupného 2,4,6-trinitrotoluenu (TNT). Posledním krokem této syntézy je kyselá hydrolyza benzen-1,3,5-triaminu, což může na první pohled vypadat jako krajně atypická reakce pro aniliny. Nakreslete tautomerní strukturu benzen-1,3,5-triaminu vysvětlující pozorovanou reaktivitu.



Řešení:

Benzen-1,3,5-triamin existuje v rovnováze s iminovým tautomerem (viz struktura), který podstupuje hydrolyzu.



Úloha F.3 (Jiří Ledvinka): Titrace

Aminokyseliny, jak název vypovídá, obsahují vedle karboxylové kyseliny i aminoskupinu. Při běžné alkalimetrické titraci bychom tedy nezískali použitelné spotřeby. Jednou poměrně starou metodou acidobazického stanovení aminokyselin je použití formalínu (vodného roztoku formaldehydu), který reaguje s aminoskupinou za vzniku příslušného iminu, který už není tolik bazický a při titraci neinterferuje s karboxylovými skupinami. Při zpětné acidimetrické titraci stejného ztitrovaného vzorku se postupným okyselením imin rozloží zpět na volný amin a formaldehyd, a spotřeba na methylčerveně odpovídá neutralizaci samotné aminoskupiny.

Navážku 232,9 mg čisté volné proteinogenní aminokyseliny (tzn. ne její soli) rozpustíme za varu v destilované vodě, přidáme ethanol a titrujeme 0,1M NaOH na fenolftalein. Spotřeba činí 25,55 ml a při přidání 50 ml 25% formaldehydu se spotřeba titračního činidla zvýší na 35,00 ml. Tento roztok zpětně titrujeme 0,1M HCl na methylčerveně. Spotřeba je 17,50 ml.

O kterou proteinogenní aminokyselinu se jedná?

Řešení:

Jak víme ze zadání, po přidání formaldehydu vzniká imin, který s titrací neinterferuje. Proto spotřeba hydroxidu za těchto podmínek odpovídá pouze karboxylové(ým) skupině(ám):

$$n(\text{COOH}) = V(\text{NaOH}) \cdot c(\text{NaOH}) = 35 \times 10^{-3} \cdot 0,1 = 3,5 \text{ mmol}$$

Naopak zpětná titrace pomocí HCl odpovídá pouze aminoskupině:

$$n(\text{NH}_2) = V(\text{HCl}) \cdot c(\text{HCl}) = 17,5 \times 10^{-3} \cdot 0,1 = 1,75 \text{ mmol}$$

Z poměru těchto dvou látkových množství vidíme, že se jedná o dvojsytnou aminokyselinu. Její molární hmotnost je

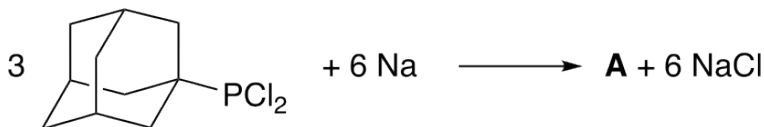
$$M = \frac{m}{n} = \frac{0,2329}{0,00175} = 133,1 \text{ g mol}^{-1},$$

což odpovídá kyselině asparagové.

Úloha F.4 (Alexandros Terzopoulos): Cyklofosfin

Wurtzova reakce je klasická reduktivní couplingová reakce, při níž dva alkyhalogenidy reagují s alkalickým kovem za vzniku delšího alkanu. Ačkoli je tento typ reakce pro moderní organickou chemii méně užitečný, stále se hojně používá v oblasti chemie hlavních skupin k vytvoření p-blokových kruhů prvků ze spojení jejich dihalidů. Jako příklad lze uvést reakci

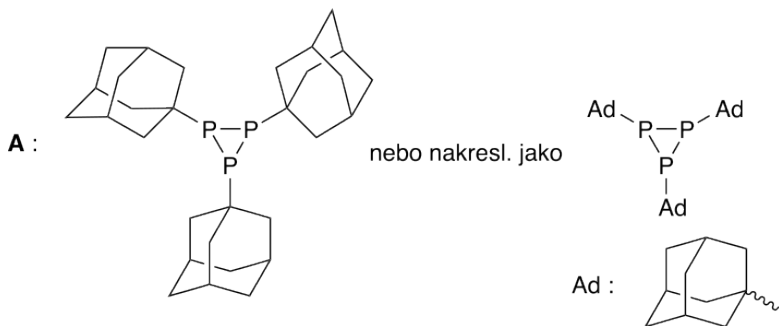
dichlor(1-adamantyl)fosfinu se sodíkem za vzniku jednoho ekvivalentu cyklofosfinu (**A**):



Podle výše uvedeného reakčního schématu načrtněte strukturu produktu **A**.

Řešení:

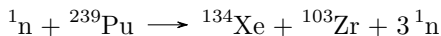
Sloučenina **A** je tříčlenný cyklofosfin (PAd)₃ (tato velikost kruhu je dána sterickým objemem adamantylové skupiny a vyplývá ze stechiometrie reakce).

**Úloha F.5 (Filip Hůlek): Fat Man**

Nedávno se jedním ze dvou kasovních trháků kin na celém světě i nositelem sedmi Oscarů stal film *Oppenheimer*, který zpracoval příběh vedoucího týmu tvořícího jadernou bombu. Robert Oppenheimer je zde mnohokrát vidět v diskuzích se známým fyzikem Albertem Einsteinem. A právě jednu z nejslavnějších rovnic Alberta Einsteina budete při této úloze potřebovat.

Při výbuchu atomové bomby *Fat Man* bylo uvolněno 21 kilotun ekvivalentu TNT. To ale zdaleka neodpovídá energii, která by se uvolnila, pokud by všechny atomy plutonia-239 v bombě podlely jadernému štěpení.

Vypočítejte, kolikrát více energie by se uvolnilo, pokud by se tak stalo. Pro výrobu bomby bylo použito 6,4 kg plutonia-239, které podlelo následující reakci:



Energie 1 tuny ekvivalentu TNT má hodnotu 4,184 GJ.

Relativní hmotnosti částic:

$$A_r({}^1_0\text{n}) = 1,0087; \quad A_r({}^{239}_{94}\text{Pu}) = 239,0522; \quad A_r({}^{134}_{54}\text{Xe}) = 133,9054; \quad A_r({}^{103}_{40}\text{Zr}) = 102,9266$$

Řešení:

Einsteinův vzorec, na který naráželo zadání, je pochopitelně slavný $E = m \cdot c^2$, který dává do souvislosti celkovou energii hmoty s její hmotností. Skutečně, odečteme-li relativní hmotnosti pravé a levé strany, nedostaneme nulu:

$$\Delta A_r = (A_r(^{134}\text{Xe}) + A_r(^{103}\text{Zr}) + 3 A_r(^1\text{n})) - (A_r(^{239}\text{Pu}) + A_r(^1\text{n})) = -0,2028.$$

Tento rozdíl odpovídá energii, v tomto případě uvolněné, jelikož znaménko je záporné. Relativní atomovou hmotnost nejprve přenásobením atomovou hmotnostní konstantou u převedeme na hmotnost, následně dosadíme do Einsteinova vzorce a nakonec vynásobíme Avogadrovou konstantou N_A , abychom dostali energii vztáženou na 1 mol reaktantů (molární reakční energii):

$$E_r = \Delta E N_A = \Delta m c^2 N_A = \Delta A_r u c^2 N_A \doteq -18\,226,755 \text{ GJ mol}^{-1}.$$

Záporné znaménko budeme od teď ignorovat, neboť naznačuje pouze, že reakce je exergonická, tj. energie se uvolňuje.

Dle zadání reagovalo 6,4 kg plutonia-239, což odpovídá látkovému množství

$$n = \frac{m}{M} = \frac{6,4 \times 10^3}{239,0522} \doteq 26,7724 \text{ mol}.$$

Teoretické maximální množství uvolněné energie E_{TEOR} tedy je

$$E_{\text{TEOR}} = E_r n \doteq 487\,973,79 \text{ GJ}.$$

Ze zadání ale víme, že reálně se uvolnila energie v daném ekvivalentu tun TNT, které převedeme na GJ:

$$E_{\text{REAL}} = 21\,000 \times 4,184 = 87\,864 \text{ GJ}.$$

Zbývá už jen určit poměr k mezi teoretickým a reálným množstvím uvolněné energie:

$$k = \frac{E_{\text{TEOR}}}{E_{\text{REAL}}} = \frac{487\,973,79}{87\,864} \doteq 5,55.$$

Pokud by všechny atomy plutonia-239 byly podlehly štěpení, bylo by se uvolnilo 5,55krát více energie.

Úloha F.6 (Martin Balouch): Analytická

Proč nikdo nechce psát úlohy z analytické chemie?

Přitom je to tak krásná část chemie. Kupříkladu takové titrace. Jeden by řekl, že je to zastaralá a dávno překonaná metoda, ale občas může být stále i užitečná.

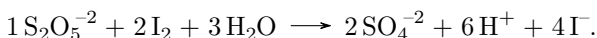
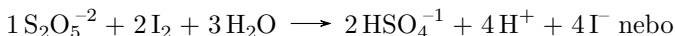
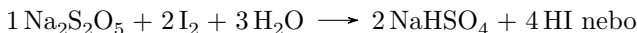
Pro farmaceutické přípravky obsahující adrenalin se používá disiřičitan sodný jako antioxidant, který brání znehodnocení adrenalinu. Pro jeho stanovení ve formulaci je právě titrace jednou z nejsnadnějších řešení, a to titrace jodometrická, kdy disiřičitan ve formulaci je titrován přebytkem roztoku jodu. Tato reakce probíhá v kyselém prostředí. Přebytečný jod je potom titrován thiosíranem sodným, který reaguje na tetrathionan.

Druhá uvedená reakce je sice sama o sobě zajímavá, ale najdete ji v každé lepší učebnici, a proto se vás na ni ptát nebudeme. Také by nyní mohlo následovat nějaké zadání se spoustou objemů a koncentrací, ale ne, to není cílem této úlohy. Postačí mi vyčíslená rovnice titrace disiřičitanu sodného jodem (může být i v iontovém tvaru).

Pro usnadnění práce našich opravovatelů bereme jako správné řešení pouze takové stechiometrické koeficienty, které jsou přirozenými čísly a zároveň nejsou všechny dělitelné jiným přirozeným číslem než jedna.

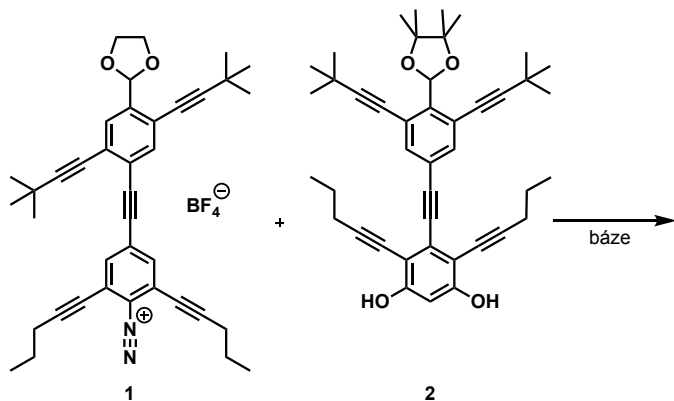
Řešení:

Disiřičitan je jodem oxidován na hydrogensíran / síran (zkrátka oxidační stav +VI). Reakci lze zapsat jako

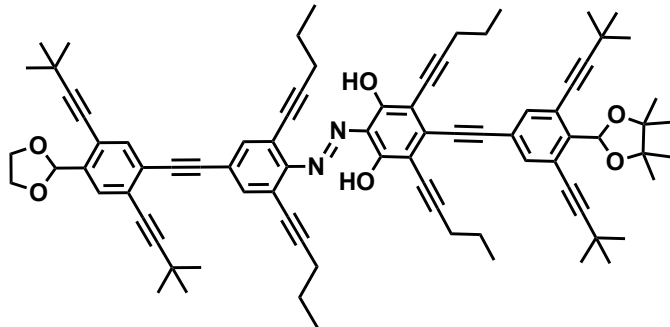


Úloha G.1 (Tomáš Marný): Není kopulace jako kopulace

Zatímco diazotace je výhradním učivem chemie, o kopulaci se dozvídáme nejen v chemii. Tak jako diazoniové soli bouřlivě reagují s fenoly za vzniku azosloučenin, v biologii je produktem vášnivé kopulace zpravidla další organismus. Nanoputians jsou molekuly připomínající tvarem postavu. Nakreslete produkt kopulace diazoniové soli **1** s molekulou **2**.

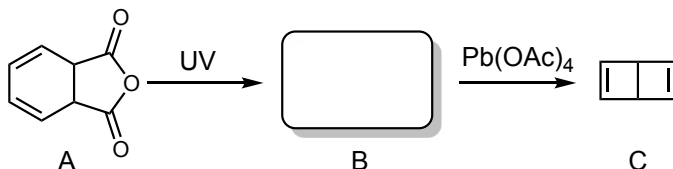
**Řešení:**

Produktem je azosloučenina s vazbou N=N vznikající mezi aromatickými jádry diazoniové soli a elektronově bohatého fenolu. Diazoniová sůl totiž jako silný elektrofil bude reagovat jen s elektronově bohatším jádrem.

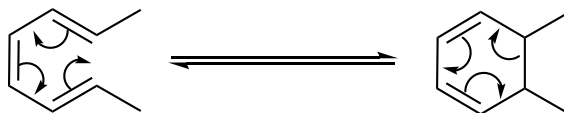
**Úloha G.2 (Štěpán Novák): Benzen, jak ho neznáte**

Benzen a jeho strukturu zná každý chemik a ne jeden nechemik. Avšak teorií o možných strukturách benzenu bylo v historii několik. Jednou z teorií byl tzv. Dewarův benzen. Dewar tuto strukturu publikoval v roce 1869 jako součást seznamu možných izomerů se strukturou C_6H_6 . Avšak netvrdil, že se jedná o strukturu benzenu, Dewar podporoval strukturu benzenu navrženou Kekulém. O téměř sto let později v roce 1963 se Eugene van Tamelen povedlo syntetizovat nesubstituovaný Dewarův benzen.

V této úloze se podíváme na jeho syntézu. Ta začíná *cis*-1,2-dihydroderivátem ftalanhydridu, který je nejprve fotochemicky převeden na tricyklickou sloučeninu **B** pomocí elektrocyklické reakce. Ta po oxidaci poskytuje námi žádaný Dewarův benzen. Nakreslete strukturu látky **B**. Obecné schéma elektrocyklické reakce naleznete níže.

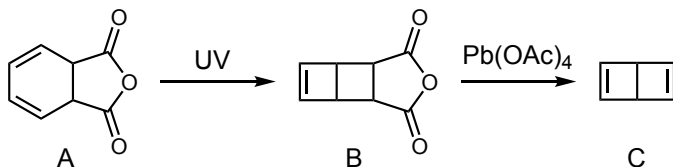


Obecné schéma elektrocyklické reakce je uvedeno níže.



Řešení:

V prvním kroku dochází k fotochemickému elektrocyklickému uzavírání kruhu, při kterém vzniká tricyklický produkt **B**.



Úloha G.3 (Štěpán Novák): Biotechnologická

Kyselina citronová se průmyslově vyrábí biotechnologickým procesem za pomoci plísně *Aspergillus niger*, která z jedné molekuly glukózy vytvoří jednu molekulu kyseliny citronové (citrátu). Tato přeměna probíhá za aerobních podmínek, tj. plíseň používá mitochondrie. S pomocí přiložených metabolických drah spočítejte, kolik molekul ATP získá plíseň z jedné molekuly glukózy. Pro zjednodušení uvažujte, že reoxidací redukováného kofaktorů NADH získá tři ATP. Mezi cykly jsou i nějaké nadbytečné.

Snažte se o maximální možný zisk ATP. Vizte metabolickou mapu dostupnou na <https://doi.org/10.5281/zenodo.14217367>.

Řešení:

Glykolýza poskytuje 2 ATP a 2 NADH (6 ATP z reoxidace v dýchacím řetězci), celkem 8 ATP. Dráha pyruvátu na AcSCoA poskytuje 3 ATP. Karboxylace pyruvátu na oxalacetát vyžaduje dodání jedné jednotky ATP. Z jedné glukózy tak plíseň získá 10 jednotek ATP.

Úloha G.4 (Supatpong Juntarawatt): Zakomplexovaná

Agent FE0000 má dva roztoky různých izomerů, které mají stejný empirický vzorec $\text{BrCoH}_{15}\text{N}_5\text{O}_4\text{S}$. Barvy jednotlivých roztoků se však od sebe liší. Jeho kvalitativní analýza přidáním vodných roztoků BaCl_2 a AgNO_3 dává výsledky, jak je uvedeno na obrázku:

Roztok	Barva vodného roztoku	BaCl_2	AgNO_3
A	Červená	Bílá pevná látka	Žádná pevná látka
B	Červeno-fialová	Žádné pevné formy	Slabě bílé pevné formy

Určete vzorec kationtového komplexu obsahujícího kobalt v každém roztoku.

Řešení:

Nejprve musíme identifikovat možné ligandy v obou komplexech. Jelikož se během experimentu objevují bělavé formy AgBr a bílé formy BaSO_4 , jde o ligandy Br^- a SO_4^{2-} . Zůstává nám tedy 5 atomů dusíku a 15 atomů vodíku. Protože barvy roztoků jsou různé, liší se i ligandy v komplexech. Zbývajících 5 ligandů obsahujících N a H by mělo být NH_3 . Anionty, které se podílejí na srážení, jsou aniontové protiionty, nikoli samotné ligandy.

Úloha G.5 (Zev Armour-Garb): Charles Darwin

Charles Darwin je známý jako průkopník evoluční teorie přírodního výběru. Je také známo, že onemocněl po konzumaci mléčných výrobků. Je to pravděpodobně proto, že Charles Darwin postrádal enzym laktázu - běžný stav známý jako intolerance laktózy. Laktáza hydrolyzuje β -glykosidickou vazbu v laktóze v poměru 1:1

enzym: substrát za vzniku D-glukózy a β -D-galaktózy. Naštěstí nesnášenlivost laktózy nebyla dostatečným selekčním tlakem a Darwin má dnes mnoho žijících potomků - dokonce i evoluce má slabost pro naši lásku k mléčným výrobkům!

Rychlost enzymatických reakcí lze popsat pomocí Michaelisovy-Mentenovy rovnice:

$$v = \frac{V_{\max} \cdot [S]}{K_M + [S]}$$

V enzymatické reakci lze koncentraci substrátu při polovině maximální reakční rychlosti popsat jeho Michaelisovou konstantou K_M . Pro laktázu-florizinhydrolázu, lidský enzym laktázu, je $K_M = 21$ mM. Jestliže člověk zkonsumuje tolik laktózy, že její reakční rychlost v

s laktáza-florizinhydrolázou je přesně dvě třetiny maxima, V_{\max} , jaká koncentrace laktózy $[S]$ byla strávena v mM?

Řešení:

Pro řešení tohoto problému můžeme použít rovnici Michaelise a Mentenové:

$$v = \frac{V_{\max} \cdot [S]}{K_M + [S]}$$

Je dáno, že $K_M = 21$ mM a $v = \frac{2}{3}V_{\max}$. Dosazením těchto hodnot do výše uvedené rovnice získáme vztah:

$$\frac{2}{3}V_{\max} = \frac{V_{\max} \cdot [S]}{21 \text{ mM} + [S]}$$

Odtud můžeme rovnici zjednodušit a získat:

$$21 \text{ mM} + [S] = \frac{3 \times [S]}{2}$$

Řešením je $[S] = 42$ mM.

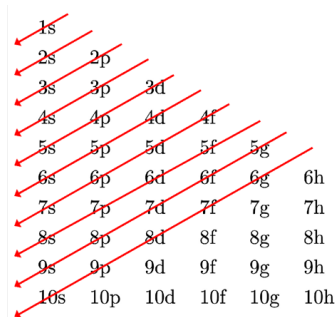
Úloha G.6 (Petr Linhart): Periodická

Chemiklání slaví 10. výročí. To je důvod nejen k oslavám, ale také k filozofickému zamyšlení. Jaká je budoucnost periodické tabulky prvků? Dočkáme se někdy její desáté periody? Je tu s námi již více než 150 let, ale dosud jsme objevili „pouze“ prvky prvních 7 period, a i ty nejtěžší z nich jsou již extrémně nestabilní (např. poločas rozpadu izotopu ^{294}Og , nejtěžšího známého prvku, je pouze 0,7 ms).

Současná relativistická kvantová teorie stanovuje hranici atomového čísla na $Z = 172$. Je to proto, že při vyšších hodnotách ($Z \geq 173$) by energetická hladina orbitalu $1s$ spadala do oblasti pozitronového kontinua. Co to však znamená pro současné výhledy 10. periody? Určete atomové číslo hypotetického prvního prvku 10. periody. Předpokládáme, že výstavbový princip platí i pro vysoká atomová čísla, stejně jako Madelungovo pravidlo, kde energie roste s $n + l$. Nezapomeňte, že pro vyšší periody tabulky budou do hry vstupovat orbitály g . Orbitály g jsou logickým pokračováním posloupnosti s, p, d, f , a mají tedy degeneraci 9 (vedlejší kvantové číslo $l = 4$).

Řešení:

Výstavbový princip říká, že se dříve obsazuje orbital s nejnižší energií, Madelungovo pravidlo $n + l$ zase říká, že nižší energii má orbital s nižším součtem hlavního kvantového čísla n a vedlejšího kvantového čísla l . Obě pravidla lze shrnout do postupu naznačeného na obrázku, kdy pořadí orbitalů určujeme po diagonálách ve směru červených šipek.



Uvědomíme-li si, že každá perioda začíná s -blokem a končí p -blokem, je z diagramu zřejmé, že poslední prvek 9. periody by měl plně obsazených 9 orbitalů s ($9 \times 1 \times 2 = 18$ elektronů), 8 setů orbitalů p ($8 \times 3 \times 2 = 48$ elektronů), 6 setů orbitalů d ($6 \times 5 \times 2 = 60$ elektronů), 4 sety orbitalů f ($4 \times 7 \times 2 = 56$ elektronů) a 2 sety orbitalů g ($2 \times 9 \times 2 = 36$ elektronů), dohromady $18 + 48 + 60 + 56 + 36 = 218$ elektronů. První prvek 10. periody by tedy měl protonové číslo $Z = 219$. Z toho plyne, že dle současné kvantové teorie se 10. perioda tabulky nikdy nedočkáme.

Úloha H.1 (Alexandr Zaykov): Pizza

Chemik Pepík si chtěl k oslavě 10. výročí Chemiklání rychle upéct svoji oblíbenou neapolskou pizzu. I tedy vzal svůj předem den odleželý kvásek (150 g hladké mouky, 150 g vody, 2,5 g medu a 5 g čerstvého droždí — lze nahradit 2,5 g sušeného), rozmíchal ve 350 g vody a poté přidal 20 g soli. Následně vmíchal polovinu ze 625 g mouky, nechal těsto chvilku odstát, a hned zapracoval druhou půlku mouky. Těsto pak nechal 30 minut kynout. Následně vytvaroval bochánky, z nich pak umně vytočil placky. Aby se mu nelepilo těsto na ruce, vždy si je pečlivě namazal olivovým olejem. A protože obstojně zvládá multitasking jako správný chemik, nahřál mezitím troubu na 220 °C. I ejhle! Když na syrovou pizzu dal všechny suroviny, které chtěl, zjistil, že ji měl péci 13 minut na 200 °C. Ze svých zkušeností též však ví, že když pizzu dělal v troubě u biochemika Jardíka, která se zvládla nahřát jen na 180 °C, trvalo mu to přesně 20 minut a 50 sekund. Chemik Pepík ale není žádné trdlo a pečlivě sleduje vědecké trio Zanoni, Peri a Bruno.¹ Ví tedy, že rychlost zahnědnutí krusty odpovídá kinetice prvního řádu. Nelenil tedy a pizzu vložil do trouby. Za 6 minut si Pepík stihl spočíst, kterák dlouho mu bude trvat pizzu upéct. Za jak dlouho od dokončení výpočtu ji musí vyndat? Jaká je aktivační bariéra zahnědnutí pizzy?²

Řešení:

Pomocí Arrheniovy rovnice a dvou známých časů si spočteme aktivační bariéru zahnědnutí.

$$k(T) = A \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{R \cdot T}\right)$$

Uvažujeme též, že zahnědnutí pizzy vedeme vždy do stejné úrovně (pizzy jsou stejně upečené):

$$k = \frac{\text{konst.}}{t}$$

A tedy píšeme:

$$\begin{aligned} \ln\left(\frac{t_2}{t_1}\right) \cdot \frac{R \cdot T_1 \cdot T_2}{T_1 - T_2} &= E_A \\ &= (42000 \pm 200) \text{ J mol}^{-1} \end{aligned}$$

¹B. Zanoni; C. Peri; D. Bruno. (1995). Modelling of browning kinetics of bread crust during baking. *LTW*, 28(6), 604–609. doi:10.1016/0023-6438(95)90008-x

²Rozumně předpokládejme, že je aktivační bariéra v takto úzkém rozmezí teplot na teplotě NEZÁVISLÁ.

Následně vypočteme požadovaný čas:

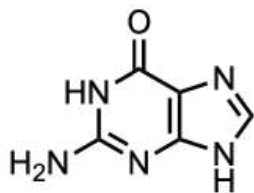
$$t_3 = t_1 \cdot \exp \left[\frac{E_A}{R} \cdot \left(\frac{T_1 - T_3}{T_1 \cdot T_3} \right) \right]$$
$$= 8 \text{ min } (26 \pm 10) \text{ s}$$

Pepíkovi zbudou 2 minuty a (26 ± 10) sekund, a stihne si tedy ještě uvařit pravou italskou kávu.

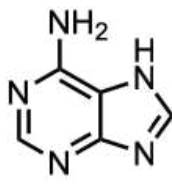
Úloha H.2 (Sam Holmes): Mutace

Do genetického kódu se mutace dostávají mnoha způsoby. Jednou z možných příčin mutace je deaminace, při níž se jedna nukleová báze přeměňuje na jinou reakcí s vodou, přičemž se jako vedlejší produkt uvolňuje amoniak. Fragment RNA prochází deaminací předtím, než je ribozomem translatován na proteinu. Fragment obsahuje kód CCU, který kóduje aminokyselinu prolin (viz tabulka).

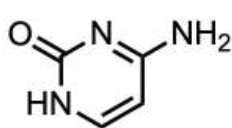
Které dvě aminokyseliny může tento triplet kódovat poté, co projde jednou mutací?



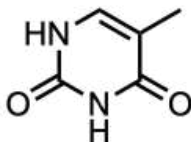
guanine



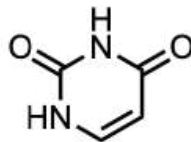
adenine



cytosine



thymine



uracil

UUU	Phe	UCU	Ser	UAU	Tyr	UGU	Cys
UUC		UCC		UAC		UGA	
UUA	Leu	UCA		UAA	Stop	UGC	Stop
UUG		UCG		UAG		UGG	Trp

CUU	Leu	CCU	Pro	CAU	His	CGU	Arg
CUC		CCC		CAC		CGA	
CUA		CCA		CAA	Gln	CGC	
CUG		CCG		CAG		CGG	

AUU	Ile	ACU	Thr	AAU	Asn	AGU	Ser
AUC		ACC		AAC		AGC	
AUA		ACA		AAA	Lys	AGA	Arg
AUG	Met/Start	ACG		AAG		AGG	

GUU	Val	GCU	Ala	GAU	Asp	GGU	Gly
GUC		GCC		GAC		GGC	
GUA		GCA		GAA	Gly	GGA	
GUG		GCG		GAG		GGG	

Řešení:

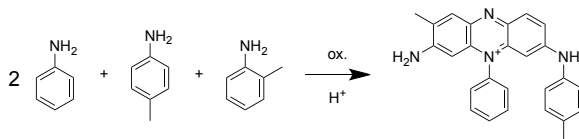
Deaminace přeměňuje C na U – takže můžeme mít CUU a UCU.. Jde o leucin a serin.

Úloha H.3 (Jakub Sochor): Mauvein

V historii přírodních věd bychom našli nespočet náhodných objevů, a chemie není v tomto ohledu výjimkou. Jistě znáte například příběh penicilinu či objevení účinků Viagry. Předmětem této úlohy je historicky velice významná ale méně známá látka jménem mauvein – první komerčně vyráběné syntetické organické barvivo vůbec. Tuto intenzivně fialovou sloučeninu neúmyslně připravil William Henry Perkin ve svých 18 letech a záhy ji nechal patentovat. Syntéza mauveinu měla pouze jeden krok – oxidaci anilinu, který obsahoval jako nečistoty *ortho*- a *para*-toluidin. V závislosti na stechiometrii reaktantů může vzniknout řada příbuzných látek, ve schématu je vyobrazena příprava tzv. mauveinu A. Znalost přesné struktury produktu nám dává značnou výhodu oproti chemikům 19. století – můžeme spočítat, kolik ekvivalentů oxidačního činidla bude pro reakci potřeba.

Vášim úkolem je nyní určit, o kolik elektronů jsou oxidovány výchozí látky při vzniku

jedné molekuly mauveinu A. (Výsledkem je jedno celé číslo).

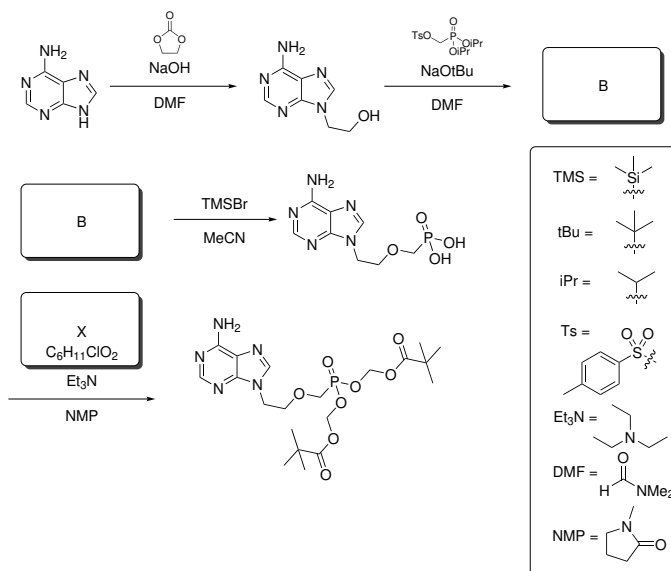


Řešení:

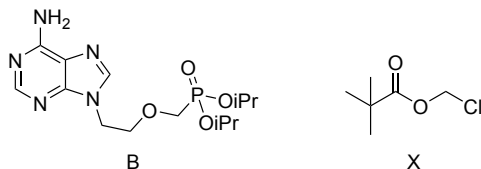
Vyjdeme ze změn oxidačních čísel jednotlivých atomů C, případně z porovnání sumárních vzorců reaktantů a produktu. Rovnice oxidační poloreakce: $2\text{C}_6\text{H}_7\text{N} + 2\text{C}_7\text{H}_9\text{N} \rightarrow \text{C}_{26}\text{H}_{23}\text{N}_4^+ + 10\text{e}^- + 9\text{H}^+$.

Úloha H.4 (Štěpán Novák): Antivirotika

Antivirotika vyvinuta profesorem Holým na Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR přinesla české vědě prestiž a ústavu miliardové příjmy z licenčních poplatků. V této úloze se podíváme na syntézu Adefoviru, přesněji jeho proléčiva adefovir dipivoxilu. Jedná se o acyklický nukleotid používaný pro léčbu hepatitidy B. Adefovir funguje jako inhibitor virové reverzní transkriptázy, čímž brání množení viru v buňce. Doplňte do schématu látku **B** a nakreslete strukturu činidla **X**.



Řešení:



V první reakci týkající se otázky dochází prvně k deprotonaci hydroxylové skupiny. Následný alkoholát poté atakuje methylenový uhlík fosfonátu a dochází k odstoupení para-toluensulfonové skupiny. Druhý krok je velmi podobný, dochází k dvojnásobné deprotonaci fosfonové kyseliny, která pak atakuje chlormethylovou skupinu činidla **X**. Struktura činidla **X** se dá snadno vyvodit ze znalosti struktury adefovir-dipivoxilu a sumárního vzorce.

Úloha H.5 (Tatiana Nemirovich): TikTok Units (Jednotky TT)

Svět už dávno překonal dobu, kdy nás zajímaly nudné kilogramy, blbé sekundy a cringe kelviny. Kdo dneska potřebuje vědět, kolik váží kilo nebo jak dlouho trvá sekunda? Představujeme nový systém základních jednotek, který posune fyziku na úroveň, kde se může setkat s vaším feedem na TikToku.

- **Blockproud (bp)** – Jednotka elektrického proudu odvozená od energie potřebné k vykopání jednoho virtuálního bloku v Minecraftu. 1 bp odpovídá proudu 0,55 A, což je přibližná spotřeba notebooku při hraní na nízké grafice.
- **TikToko-pauza (tp)** – Čas, po který zvládnete ignorovat TikTok, než vás přemůže potřeba ho znovu otevřít. 1 tp = 3,2 s.
- **Bezпивní vzdálenost (bpv)** – Vzdálenost, kterou člověk ujde na festivalu nebo koncertu, než si konečně dojde pro další pivo. 1 bpv = 15 m.
- **Energetický plech (ep)** – Hmotnost prázdného plechu od energetického nápoje Tiger. 1 ep = 0,106 kg.
- **Cropkelvin (ck)** – Jednotka teploty, která odpovídá teplotě, při níž už je v crop topu opravdu zima. 1 ck = 288 K.
- **Litromol (lm)** – Množství alkoholu odpovídající jedné promile alkoholu v krvi u dospělého člověka, 0,8 molu ethanolu.
- **Feedlight (fl)** – Jednotka svítivosti mobilního displeje při prohlížení Instagramu v úplné tmě, která vás přinutí přemýšlet, proč ještě nespíte. Typický telefon v tmavém režimu a nízkém jasu má celkovou svítivost displeje kolem 4,2 cd.

Vaším úkolem bude spočítat hodnotu Planckovy konstanty za použití základních TikTok jednotek.

Řešení:

Nejdůležitější je pochopit že 1 J je definován jako $\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2$, tudíž Planckova konstanta má jednotku $\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}$. Pak už jen dosadíme:

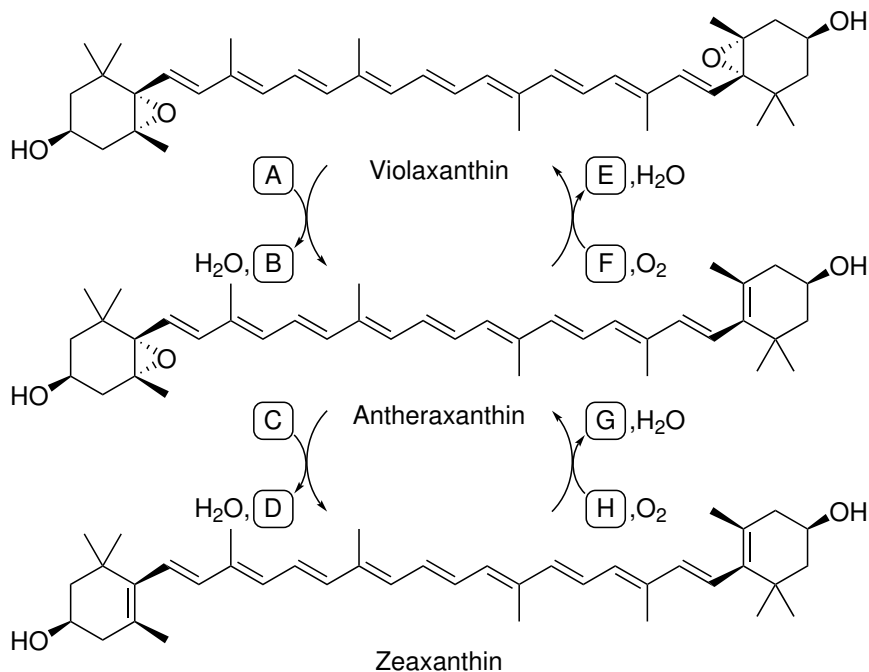
$$\begin{aligned}h &= 6,626 \times 10^{-34}/[\text{ep} \cdot \text{bpv}^2 \cdot \text{tp}^{-1}] \\ &= 6,626 \times 10^{-34}/[0,106 \cdot 15^2 \cdot 3,2^{-1}] \\ &= 8,89 \times 10^{-35} \text{ep} \cdot \text{bpv}^2 \cdot \text{tp}^{-1}\end{aligned}$$

Úloha H.6 (Vojtěch Laitl): Rozsivky

Rozsivky (*Bacillariophyceae*) jsou zajímavou skupinou mořských mikrořas, v jejichž buňkách nalezneme organická barviva odvozená od β -karotenu. Tři z nich, violaxanthin (oranžový), antheraxanthin (oranžovožlutý) a zeaxanthin (žlutý) na sebe mohou přecházet enzymatickými redoxními reakcemi, jak ukazuje následující schéma: Přeměna jedním směrem využívá koenzym $\text{NADPH}-\text{H}_3\text{O}^+$, přeměna druhým směrem mastnou kyselinu dokosaheptaenovou (DHA). Doplňte naznačené schéma přiřazením následujících sloučenin k písmenům **A–H**:

- $\text{NADPH}-\text{H}_3\text{O}^+$
- NADP^+ (oxidovaná forma koenzymu)
- DHA (dokosaheptaenová kyselina)
- DHAH_2 (redukováná forma dokosaheptaenové kyseliny)

Využijte oxidačních čísel/stavů a skutečnosti, že redukováný koenzym NADPH je jako jedno z nejsilnějších biologických redukčních činidel schopné přímé redukce kyslíku. Libovolné ze sloučenin může být potřeba přiřadit vícekrát.

**Řešení:**A a C: DHAH₂

B a D: DHA

E a G: NADP⁺F a H: NADPH–H₃O⁺

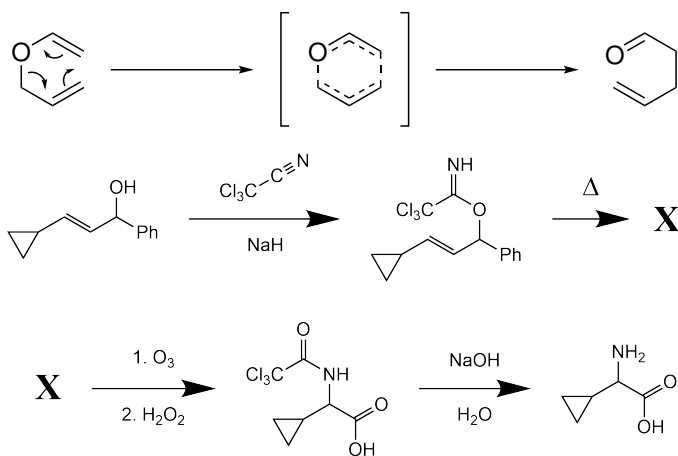
Šipky na pravé straně znázorňují zespoda nahoru epoxidaci vždy jedné dvojné vazby vzdušným kyslíkem. Při této reakci je spotřebován 1 atom kyslíku z molekuly O₂ a druhý je podle schématu redukován na vodu. Této redukce je schopen pouze koenzym NADPH–H₃O⁺, vedlejším produktem je pak oxidovaný NADP⁺. Zbývající šipky na levé straně vylučovací metodou zahrnují dokosahexaenovou kyselinu a popisují redukcí uvažovaných barviv. Šipky seshora dolů, zakreslené ve směru probíhající reakce, tedy vždy začínají redukováným derivátem DHAH₂.

Úloha K.1 (Jakub Sochor): Pericyklická

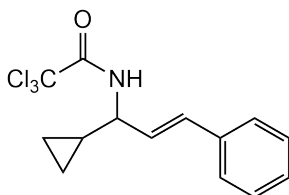
Overmanův přesmyk je reakce používaná pro přípravu allylických aminů a derivátů aminokyselin. Na obrázku je znázorněno schéma syntézy cyklopropylglycinu.

Nejprve reaguje allylový alkohol s trichloracetonitrilem v přítomnosti báze za vzniku trichloracetimidátu. Jeho zahřátím dochází k [3,3]-sigmatropnímu přesmyku na meziprodukt **X**. Ozonolýzou s oxidativním zpracováním a následnou bazickou hydrolyzou meziproduktu **X** obdržíme cyklopropylglycin. Nakreslete strukturu meziproduktu **X**.

Příklad [3,3]-sigmatropního přesmyku (Claisenova přesmyku) je uveden níže.



Řešení:

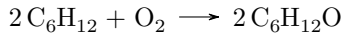


Overmanův přesmyk je jedna z variací hetero-Claisenova přesmyku.

Úloha K.2 (Vojtěch Laitl): Reaktorová

Reaktor s pístovým tokem je užitečný model pro řadu chemických procesů. Předpokládáme, že reaktanty procházejí reaktorem (typicky dlouhou trubkou) konstantní rychlostí jedním směrem a ve všech ostatních směrech jsou neustále promíchávány. Popis reakční kinetiky je tak podobný základním rovnicím, přestože obsahuje prostorovou složku. V průmyslu se tyto reaktory používají například pro oxidaci cyklohexanu vzdušným kyslíkem, která je prvním krokem výroby nylonu-6.

Reakce



využívá cyklohexan současně jako reaktant a jako rozpouštědlo. Je tak reakcí pseudoprvního řádu a pro koncentraci kyslíku platí

$$[\text{O}_2] = [\text{O}_2]_0 \cdot e^{-k\tau},$$

τ je čas, který kyslík stráví v reaktoru, a k je rychlostní konstanta. V průmyslu potřebujeme dosáhnout velké konverze kyslíku, aby jeho zbytky nepředstavovaly riziko pro navazující vysokoteplotní procesy. Mějme trubkový reaktor o délce 10 m naplněný cyklohexanem. Kyslík do něj přivádíme ze vzduchu o teplotě 300 K, rychlostní konstanta za těchto podmínek $k = 3,05 \text{ s}^{-1}$. Při rychlosti proudění $6,6 \text{ m s}^{-1}$ dosáhneme konverze O_2 99 % ($[\text{O}_2] = 0,01[\text{O}_2]_0$). Jakou rychlostí můžeme vzduch vhnět, pokud se spokojíme s konverzí 95 %?

Řešení:

Rezidenční čas τ můžeme spočítat, jak jsme zvyklí pro rovnoměrný pohyb, tedy

$$\tau = \frac{l}{v}.$$

Odtud

$$\ln\left(\frac{[\text{O}_2]}{[\text{O}_2]_0}\right) = -k \cdot \frac{l}{v}$$

a

$$v = -\frac{k \cdot l}{\ln\left(\frac{[\text{O}_2]}{[\text{O}_2]_0}\right)}.$$

Dosažením se přesvědčíme, že pro první případ opravdu platí

$$v = -\frac{3,05 \cdot 10}{\ln(0,01)} = 6,6 \text{ m s}^{-1}.$$

Tyto údaje slouží pro kontrolu, pokud bychom si výpočtem τ nebyli jistí. Zbývá dosadit údaje pro konverzi 95 %

$$v = -\frac{3,05 \cdot 10}{\ln(0,05)} = 10,2 \text{ m s}^{-1}.$$

Čím větší rychlost použijeme, tím menší bude reakční konverze, protože reaktanty setrvávají v reaktoru kratší dobu.

Úloha K.3 (Jiří Ledvinka): Ze sedmého schodu

Pepa si v obchodě koupil chlazené pivo, ale cestou domů zjistil, že si omylem koupil nealkoholické. Rozhodl se ho tedy opravit přidáním 20 g ethanolu pro UV-VIS spektroskopii (čistota min. 99,99%), který skladuje v lednici při 4 °C. Jako vzdělaný chemik ale věděl, že se míšením vody s ethanolem směs zahřeje. Proto si výpočtem ověřil, jestli se mu pivo neohřeje na nepříjemnou teplotu. Pivo aproximujme 500 g vody o původní teplotě 4 °C a pojďme počítat s Pepou. Molární hmotnosti vody a ethanolu jsou postupně 18,02 g mol⁻¹ a 46,07 g mol⁻¹. Tepelnou kapacitu směsi v tomto teplotním rozsahu můžeme pokládat rovnou 75,35 J mol⁻¹ K⁻¹. Dodatková enthalpie směsi ethanol-voda (tedy enthalpie vzniklá přípravě jednoho molu směsi o daném molárním zlomku ethanolu x z čistých složek) pro tuto teplotu je popsána následujícími polynomy:

$$hE [\text{J mol}^{-1}] = 34\,752x^2 - 10\,422x$$

pro $0 \leq x < 0,157$, a

$$hE [\text{J mol}^{-1}] = 659,53x^3 - 1455,3x^2 + 1794,8x - 1035,6$$

pro $0,157 \leq x < 1$, kde x je molární zlomek.

Jaká byla výsledná teplota spraveného piva?

Řešení:

Při opravování piva Pepa smíchá 20 g ethanolu s 500 g vody. Molární zlomek ethanolu je tedy

$$\begin{aligned} x &= n(\text{EtOH})/[n(\text{EtOH}) + n(\text{H}_2\text{O})] \\ &= \frac{m(\text{EtOH})/M(\text{EtOH})}{[m(\text{EtOH})/M(\text{EtOH})] + [m(\text{H}_2\text{O})/M(\text{H}_2\text{O})]} \\ &= \frac{20/46,07}{(20/46,07) + (500/18,02)} \\ &= 0,01540. \end{aligned}$$

Pro vypočtení dodatkové enthalpie tedy dosadíme do první rovnice a získáme

$$hE = -152 \text{ J mol}^{-1}.$$

Směs se ohřeje o teplotu

$$\begin{aligned} \Delta T &= \frac{hE \cdot n}{C \cdot n} = hE/C \\ &= 152/75,35 \\ &= 2,02 \text{ K} \end{aligned}$$

Výsledná teplota bude potom 6,02 °C.

Úloha K.4 (Štěpán Novák): Time for smiles!

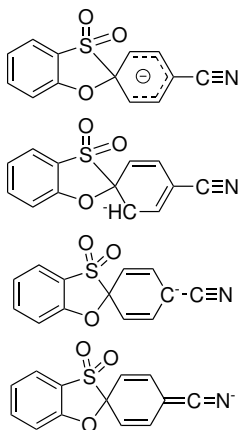
Time for smiles, more organic chemistry! Smilesův přesmyk je reakce, při které dochází k intramolekulární nukleofilní aromatické substituci za vzniku spirocyklického intermediátu a přesmyku aromátu. Vaším úkolem je nakreslit reakční intermediát nukleofilní substituce.



Řešení:

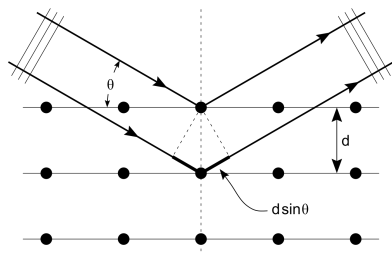
Jde o tzv. Meisenheimerův komplex. (Správná odpověď je jakákoli platná rezonanční struktura.)

Prvně dochází k deprotonaci OH skupiny, která následně atakuje uhlík nesoucí sulfonylovou skupinu. Posunem elektronů se přesune záporný náboj až na nitrilový dusík. Zpětným posunem elektronů se buď regeneruje výchozí látka, nebo se elektrony přesunou až na sulfon a odstoupí sulfinová kyselina.

**Úloha K.5 (Quyll Pavlakovic): Polonium**

Andrej má vzorek izotopicky obohaceného polonia s hustotou $9,026 \text{ g cm}^{-3}$. Polonium je unikátní tím, že je jediným prvkem, který krystalizuje v jednoduché kubické struktuře. Aby zjistil mřížkový parametr, požádá Andrej o pomoc Dmitrije a jeho rentgenový difraktometr. Dmitrijův přístroj vysílá rentgenové paprsky o vlnové délce $1,937 \text{ \AA}$. Pokud je dráhový rozdíl mezi odrazy od sousedních vrstev v krystalu polonia celočíselným násobkem vlnové délky, rentgenové paprsky se konstruktivně interferují a odrazí. Pokud dráhový rozdíl není celočíselným násobkem vlnové délky, dochází k destruktivní interferenci a rentgenový paprsek se neodrazí. Tento jev lze shrnout pomocí Braggovy rovnice

$$n\lambda = 2d \cdot \sin \theta.$$



U jednoduché kubické struktury jsou vzdálenosti mezi sousedními atomy, parametr mřížky a d (vzdálenost mezi rovinami), všechny stejné.

První řád ($n = 1$) odrazu odpovídá úhlu difrakce $33,516^\circ$, což odpovídá 2θ na diagramu. Určete, který izotop polonia obsahuje Andrejův vzorek.

Řešení:

Jelikož zkoumáme první řád odrazu, platí $n = 1$. Úpravou Braggovy rovnice získáme

$$d = \frac{\lambda}{2\sin \theta} = \frac{1,937 \text{ \AA}}{2\sin(16,758^\circ)} = 3,359 \text{ \AA}.$$

Molární hmotnost lze pak získat s použitím hustoty a Avogadrovy konstanty

$$M = \rho \cdot d^3 \cdot N_A = 9,026 \text{ g cm}^{-3} \times (3,359 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 \times 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} = 206,00 \text{ g mol}^{-1}$$

Tato molární hmotnost odpovídá izotopu ^{206}Po .

Úloha K.6 (Ondřej Daněk): Fotoafinitní značení

Fotoafinitní značení (photoaffinity labelling, PAL) je přístup používaný v medicínské chemii a chemické biologii k identifikaci cílových proteinů malých molekul. Když je například izolován nový přírodní produkt, který vykazuje nějakou zajímavou biologickou aktivitu, není snadné zjistit, s jakým enzymem nebo receptorem v buňce interaguje a díky tomu tak účinkuje. Studovaná malá molekula může být synteticky upravena tak, aby obsahovala skupinu, která je za normálních fyziologických podmínek stabilní, ale po ozáření (obvykle UV) světlem se přemění na vysoce reaktivní meziprodukt, který se může kovalentně vázat na aminokyselinové zbytky ve vazebném místě cílového proteinu. Jiné syntetické modifikace malé molekuly mohou být použity k začlenění terminálního alkynu, který může být později použit pro mědi katalyzovanou alkyln-azidovou cykloadiční reakci (CuAAC) například s azidy nesoucími fluorofory nebo biotin, což umožňuje identifikovat cílový protein na elektroforézním gelu (případ fluoroforu) nebo jej přímo izolovat z buněčného lyzátu bioafinitní chromatografií (případ biotinu s použitím streptavidinového pulldownu). Tyto modifikace jsou ukázány na příkladu přírodního cyklického peptidu HUN-7293 (na obrázku).

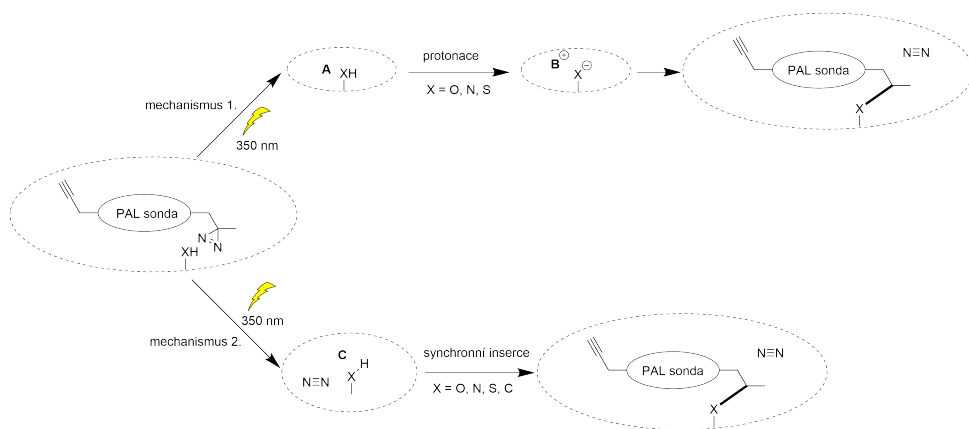
Jednou z fotolabilních skupin, které jsou často součástí PAL sond, je diazirinový kruh, který je téměř bioisosterický (podobně veliký) methylové skupině, a po ozá-

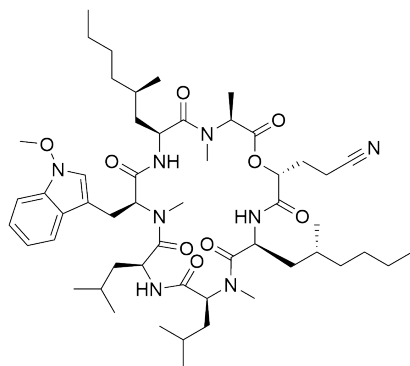
ření UV světlem (350 nm) může generovat dva různé reaktivní intermediáty dvěma různými mechanismy. Vazbu PAL sond na heteroatomy ve vedlejších řetězcích aminokyselin cílového proteinu lze vysvětlit oběma těmito mechanismy, ale vazbu na uhlíkové atomy v postranních řetězcích aminokyselin, jako je například alanin nebo valin, lze vysvětlit pouze druhým mechanismem.

V prvním mechanismu dochází po ozáření diazirinové PAL sondy nejprve ke tvorbě meziprojektu **A** (který je izomerem původní sondy). Tento meziprojekt může být protonován OH, NH₂ nebo SH skupinami v postranních řetězcích aminokyselin, což vede ke vzniku kationtu **B**. Kationický intermediát **B** může být poté atakován deprotonovaným heteroatomem v nukleofilní substituci, což vede ke kovalentnímu připojení sondy PAL a oddělení molekulárního dusíku (N₂).

Druhý mechanismus, který ve srovnání s prvním probíhá méně často, vytváří po ozáření sondy PAL reaktivní meziprojekt **C** a v tomto případě vzniká rovnou v tomto kroku molekulární dusík. Reaktivní meziprojekt **C** se pak může jednkrokovou reakcí (probíhající synchronním mechanismem) kovalentně navázat na vedlejší řetězec libovolné aminokyseliny insercí atomu uhlíku z diazirinu do vazby O-H, N-H, S-H nebo dokonce C-H. (na obrázku)

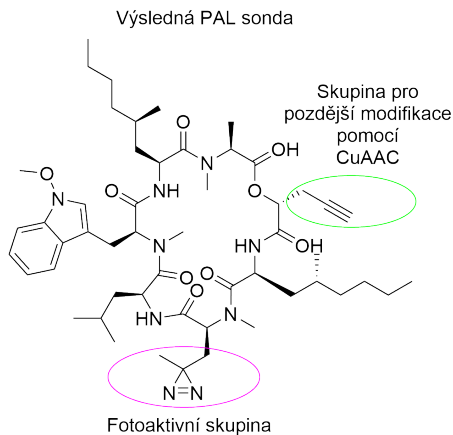
Nakreslete Lewisovy elektronové struktury reaktivních meziprojektů **A**, **B** a **C** s využitím zjednodušené struktury PAL sondy používané na obrázku.





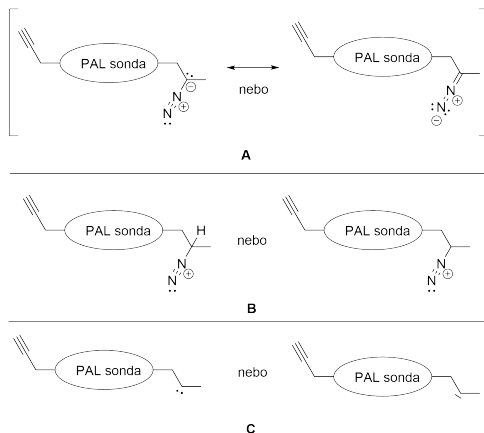
HUN-7293

Přírodní produkt, inhibitor buněčné adheze

**Řešení:**

Látka **A** musí být isomer původní PAL sondy, který může být snadno protonován a později uvolnit dusík jako odstupující skupinu v nukleofilní substituci. Nejrozumnější možností je tedy příslušný derivát diazomethanu, který lze zakreslit v několika rezonančních strukturách. Pro účely této úlohy je nejdůležitější rezonanční struktura se záporným nábojem lokalizovaným na uhlíku, ale uznávány jsou všechny správné rezonanční struktury. Kationický intermediát **B** je pak produktem protonace **A** na uhlíku, tedy alkyldiazonium. Elektroneutrální a zároveň velice reaktivní látka **C**, která vzniká za uvolnění molekuly dusíku, pak musí být příslušný karben.

Samotnou reakcí vzniká singletový karben, ale mezisystémovým křížením může poté přecházet na tripletový karben, který místo synchronní inserce do vazby X-H reaguje sérií radikálových reakcí. Pro zjednodušení textu úlohy byla v zadání tato informace vynechána a uznávány byly obě možné struktury singletového (s čárkou symbolizující elektronový pár) i tripletového (se dvěma tečkami symbolizujícími nespárované elektrony) karbenu.



Více informací o experimentálním postupu při fotoafinitním značení proteinů si můžete přečíst zde:

<https://doi.org/10.1002/9780470559277.ch090167>

Úloha L.1 (Martin Balouch):

„Wenn du mich siehst, dann weine.“ („Spatříš-li mne, plač!“)

Tento slavný nápis z hladového kamene v Děčíně se dá použít i pro tuto úlohu. Zejména, nemáte-li rádi klasickou analytiku.

Při analýze neznámého podvojného šťavelanu jste postupovali následovně:

Nejdříve jste odvážili 0,242 g onoho neznámého šťavelanu a rozpustili jste ho v 250 ml odměrné baňce v destilované vodě okyselené kyselinou sírovou a doplnili jste ho na rysku, čímž jste vytvořili zásobní roztok.

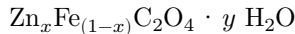
Pak jste odpipetovali 10 ml ze zásobního roztoku, přidali malé množství kyseliny sírové, to vše zahřáli a za horka jste titrovali odměrným roztokem manganistanu draselného ($c = 0,002 \text{ mol } \ell^{-1}$) do lehce růžového zabarvení. Výsledkem titrace byla průměrná spotřeba 10,6 ml.

Následně jste vzali znovu 10 ml ze zásobního roztoku, ale tentokrát jste přidali 15 ml roztoku čpavku, čímž se vám v kádince vytvořila světle zelená sraženina hydroxidu železnatého a v roztoku vznikly rozpustné ionty tetrahydroxidozinečnaté. Sraženinu jste odfiltrovali a filtrát převedli do 100 ml odměrné baňky a tu doplnili na rysku. Z této 100 ml odměrné baňky jste 3× pipetovali 10 ml a pokaždé titrovali roztokem

EDTA ($0,002 \text{ mol } \ell^{-1}$) s použitím malého množství indikátoru, až jste získali průměrnou spotřebu $2,4 \text{ ml}$. Uveďte empirický vzorec podvojného oxalátu. Uvažujte, že se může jednat o hydrát.

Řešení:

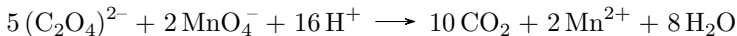
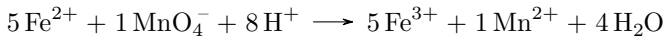
V textu najdeme informace o iontech, které podvojný šťavelan tvoří: železnaté a zinečnaté ionty. Jelikož jsou oba 2 kationty dvojmocné, dá se empirický vzorec napsat jako:



Teď už jenom znát hodnoty x a y . Začneme zinkem, který je po odfiltrování hydroxidu železnatého jediný kov, který je komplexovaný EDTA. EDTA komplexuje kovy v poměru 1:1, tudíž ze spotřeby a koncentrace EDTA získáme přímo látkové množství zinečnatých kationtů. Jelikož se během analýzy odebíralo a ředilo, přepočítáme to rovnou na celý vzorek:

$$n_{\text{Zn}} = 0,002 \text{ mol } \ell^{-1} \times 0,0024 \ell \times 250 \doteq 1,20 \times 10^{-3} \text{ mol}$$

A teď železo. Klíčem teď jsou vyčíslené rovnice oxidace manganistanem draselným. Jelikož probíhá v kyselém prostředí, vznikají manganaté ionty. Oxidováno je jak železo, tak i šťavelan. Probíhají tedy 2 reakce dle následujících rovnic:



Celková spotřeba manganistanu draselného se dá tedy rozdělit na látková množství šťavelanu a železnatých kationtů (pozor na stechiometrické koeficienty!). Platí:

$$n_{\text{KMnO}_4} = \frac{1}{5} \times n_{\text{Fe}} + \frac{2}{5} \times n_{\text{C}_2\text{O}_4}$$

Látkové množství manganistanu v celém vzorku se dá vypočítat:

$$n_{\text{KMnO}_4} = 0,002 \text{ mol } \ell^{-1} \times 0,0106 \ell \times 25 = 5,30 \times 10^{-4} \text{ mol}$$

A teď nám musí pomoci už známé látkové množství zinečnatých iontů a uvědomění si, že látkové množství šťavelanu se musí rovnat součtu zinečnatých a železnatých iontů.

$$n_{\text{C}_2\text{O}_4} = n_{\text{Fe}} + 1,20 \times 10^{-3} \text{ mol}$$

Zůstaly nám tedy 2 rovnice o 2 neznámých, které snadno vyřešíme například dosazením za látkové množství šťavelanu do první rovnice.

$$n_{\text{KMnO}_4} = 5,30 \times 10^{-4} \text{ mol} = \frac{1}{5} \times n_{\text{Fe}} + \frac{2}{5} \times (n_{\text{Fe}} + 1,20 \times 10^{-3} \text{ mol})$$

$$5,30 \times 10^{-4} \text{ mol} = \frac{1}{5} \times n_{\text{Fe}} + \frac{2}{5} \times n_{\text{Fe}} + 4,80 \times 10^{-4} \text{ mol}$$

$$n_{\text{Fe}} = 0,0833 \times 10^{-3} \text{ mol}$$

Z toho jednoduše:

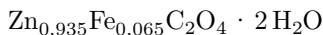
$$n_{\text{C}_2\text{O}_4} = 1,2833 \times 10^{-3} \text{ mol}$$

Jelikož jsme dosud pracovali se skutečnými látkovými množstvími v celém vzorku, můžeme spočítat hmotnost podvojného šťavelanu bez vody.

$$m_{\text{bezvody}} = n_{\text{C}_2\text{O}_4} \times M_{\text{C}_2\text{O}_4} + n_{\text{Fe}} \times M_{\text{Fe}} + n_{\text{Zn}} \times M_{\text{Zn}}$$

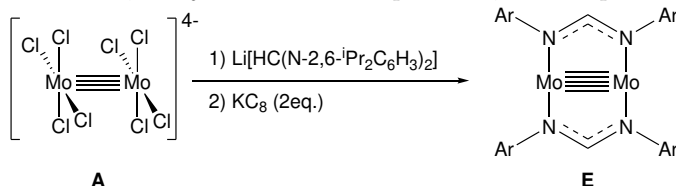
$$m_{\text{bezvody}} = 1,2833 \times 10^{-3} \text{ mol} \times 88 \text{ g mol}^{-1} + 0,0833 \times 10^{-3} \text{ mol} \times 55,845 \text{ g mol}^{-1} + 1,2 \times 10^{-3} \text{ mol} \times 65,38 \text{ g mol}^{-1}$$

Na vodu tedy zbývá 0,046 g, což odpovídá $2,555 \times 10^{-3}$ mol A teď už jenom všechna látková množství podělit látkovým množstvím šťavelanových aniontů, a dostaneme požadovaný empirický vzorec:



Úloha L.2 (Supatpong Juntarawatt): Vazebná

Chemici již mnoho let úspěšně vytvářejí vícenásobné vazby mezi dvěma atomy přechodných kovů. Díky pěti d-orbitalům, které se podílejí na vzniku vazby, lze pozorovat čtverné (4násobné) a paterné (5násobné) vazby. Níže uvedená reakce (Tsai et al., 2009) ukazuje syntézu paterné vazby Mo–Mo v **E** ze sloučeniny **A** se čtvernou vazbou Mo–Mo. Ar v **E** je 2,6-diisopropylfenylová skupina. Zjistilo se, že čtverné a paterné vazby sledují trend vlastností jednoduché, dvojně a trojně vazby C–C v organické chemii. Uveďte, zda jsou tato tvrzení pravdivá, nebo nepravdivá.



- Vzdálenost Mo–Mo v **E** je delší než v **A**.
- Vazba Mo–Mo v **E** vyžaduje k protažení větší energii než vazba Mo–Mo v **A**, přičemž se zanedbá vliv rozdílnosti ligandů.
- Formální oxidační stav Mo v **A** je +4.

- (iv) Formální oxidační stav Mo v **E** je +1.
- (v) Z reakčního schématu vyplývá, že KC_8 v kroku 2) je oxidační činidlo.

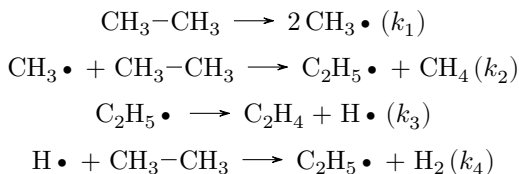
Řešení:

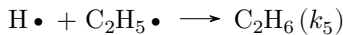
- (i) Řád vazby Mo–Mo vazby je větší v **E** než v **A**. Čím vyšší je řád vazby, tím kratší je pak samotná vazba. Tedy vazba Mo–Mo v **E** je kratší, nežli vazba v **A**, a tedy je tvrzení nepravdivé.
- (ii) Jelikož je síla vazby slabší s rostoucím řádem vazby, vazba Mo–Mo v **E** je silnější. Podobně jako u tuhé pružiny je energie potřebná k rozkmitání kovkové vazby v **E** větší, což činí toto tvrzení pravdivým.
- (iii) Každý chloridový anion přispívá nábojem -1 , tedy „celkový“ náboj na obou Mo je $-4 - (8 \times -1) = +4$. Jelikož zde jsou 2 Mo atomy na jeden komplexový anion, tak formální oxidační stav Mo je $+\frac{4}{2} = +2$, a tedy tvrzení je nepravdivé.
- (iv) Zdroj amidinátu (ten nový ligand) má pouze jeden lithiový kation na vzorcovou jednotku. Tedy může být vydedukováno, že amidinát má formální náboj -1 , což nám tvoří „celkový“ formální náboj na obou Mo $-(-2) = +2$. Jelikož jsou zde 2 Mo na anion komplexu, formální oxidační stav Mo je $+\frac{2}{2} = +1$, což činí toto tvrzení pravdivým.
- (v) Jelikož oxidační stav Mo se snižuje z $+2$ na $+1$, Mo je redukován. KC_8 je zde tedy redukčním činidlem, a toto tvrzení je nepravdivé.

Úloha L.3 (Ondřej Daněk): Tepelná dehydrogenace

Tepelná dehydrogenace je reakce využívaná v průmyslu pro výrobu alkenů z alkanů. Alkany jsou zahřívány na velmi vysoké teploty a prostřednictvím radikálového mechanismu uvedeného níže vzniká vodík a odpovídající alkeny. V loňském ročníku jste viděli, že banány produkují ethylen v nepatrných množstvích. Získávat tento plyn z banánů je ale pro průmyslové využití neudržitelné.

V této úloze se zaměříme na pyrolýzu ethanu, která se používá pro velkovýrobu ethyleny – velmi důležité chemikálie pro výrobu polyethylenu. Každou z následujících reakcí lze popsat pomocí rychlostních konstant k_1 – k_5 :





Použijte tyto konstanty a aproximaci stacionárního stavu pro koncentrace reaktivních radikálů a odvoďte vzorec pro rychlost tvorby ethyleny. Zjednodušte vzorec za předpokladu, že k_1/k_3 je zanedbatelné ve srovnání s $(k_1 k_4)/(k_3 k_5)$.

Řešení:

Z kroků propagace je zřejmé, že rychlost tvorby ethyleny musí být:

$$v = k_3 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet].$$

Koncentraci ethylového radikálu lze poté odvodit pomocí aproximace stacionárního stavu (předpoklad, že koncentrace radikálových částic se v čase nemění). Nejprve lze aproximaci stacionárního stavu pro koncentrace reaktivních radikálových částic formulovat následovně:

$$\frac{d[\text{CH}_3 \bullet]}{dt} = 2 k_1 [\text{C}_2\text{H}_6] - k_2 [\text{CH}_3 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] = 0.$$

To lze poté upravit na:

$$[\text{CH}_3 \bullet] = 2 \frac{k_1}{k_2},$$

$$\frac{d[\text{H} \bullet]}{dt} = k_3 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] - k_4 [\text{H} \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] - k_5 [\text{H} \bullet] [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] = 0.$$

To lze poté upravit na:

$$[\text{H} \bullet] = \frac{k_3 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}{k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}.$$

Tyto dvě koncentrace lze přímo použít v aproximaci stacionárního stavu pro koncentraci ethylového radikálu:

$$\frac{d[\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}{dt} = k_2 [\text{CH}_3 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] - k_3 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] + k_4 [\text{H} \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] - k_5 [\text{H} \bullet] [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] = 0,$$

$$k_2 \left(2 \frac{k_1}{k_2} \right) [\text{C}_2\text{H}_6] - k_3 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] + k_4 \frac{k_3 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}{k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]} [\text{C}_2\text{H}_6] - k_5 \frac{k_3 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}{k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]} [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] = 0.$$

Tato rovnice může být upravena na:

$$\begin{aligned}
 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] &= \frac{2 k_1 [\text{C}_2\text{H}_6] + k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] \frac{k_3 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}{k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}}{k_3 + k_5 \frac{k_3 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}{k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}} \\
 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] &= \frac{\frac{2 k_1 k_4 [\text{C}_2\text{H}_6]^2 + 2 k_1 k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] + k_3 k_4 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6]}{k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}}{\frac{k_3 k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + 2 k_3 k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}{k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}} \\
 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] &= \frac{2 k_1 k_4 [\text{C}_2\text{H}_6]^2 + 2 k_1 k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] + k_3 k_4 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6]}{k_3 k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + 2 k_3 k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 0 &= \left(2 k_1 k_4 [\text{C}_2\text{H}_6]^2 + 2 k_1 k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] + k_3 k_4 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] \right. \\
 &\quad \left. - k_3 k_4 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] - 2 k_3 k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]^2 \right) / \left(k_3 k_4 [\text{C}_2\text{H}_6] + k_3 k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] \right)
 \end{aligned}$$

Jelikož je tento zlomek roven nule, musí být samotný čitatel roven nule:

$$\begin{aligned}
 2 k_1 k_4 [\text{C}_2\text{H}_6]^2 + 2 k_1 k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] + k_3 k_4 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] \\
 - k_3 k_4 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] [\text{C}_2\text{H}_6] - 2 k_3 k_5 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]^2 = 0.
 \end{aligned}$$

Donásobíme $\frac{1}{-k_3 k_5}$ a dostaneme

$$0 = -\frac{2 k_1 k_4}{k_3 k_5} [\text{C}_2\text{H}_6]^2 - \frac{2 k_1}{k_3} [\text{C}_2\text{H}_6] [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] + 2 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]^2.$$

Zde můžeme využít předpoklad, že k_1/k_3 je zanedbatelné vůči $(k_1 k_4)/(k_3 k_5)$, jak je uvedeno v zadání, což zjednoduší rovnici na

$$\begin{aligned}
 0 = -\frac{2 k_1 k_4}{k_3 k_5} [\text{C}_2\text{H}_6]^2 + 2 [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]^2 &\Leftrightarrow [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet]^2 = \frac{k_1 k_4}{k_3 k_5} [\text{C}_2\text{H}_6]^2 \\
 &\Rightarrow [\text{C}_2\text{H}_5 \bullet] = \sqrt{\frac{k_1 k_4}{k_3 k_5}} [\text{C}_2\text{H}_6].
 \end{aligned}$$

Nakonec můžeme tento vzorec pro stacionární koncentraci ethylového radikálu dosadit do vzorce pro rychlost, který jsme odvodili na začátku řešení, a získat konečnou odpověď:

$$v = k_3 \sqrt{\frac{k_1 k_4}{k_3 k_5}} [\text{C}_2\text{H}_6].$$

Úloha L.4 (Nathaniel Loh): Boranové klastry

Bor tvoří klastrové sloučeniny s vodíkem, které obsahují kostru borových atomů spojených do mnohostěnu založeného na konvexním deltaedru. Deltaedr je mnohostěn, jehož všechny stěny jsou rovnostranné trojúhelníky. Existuje právě jeden deltaedr pro každý počet vrcholů od 4 do 10, a také jeden pro 12 vrcholů. Tato otázka se týká geometrie těchto borových koster.

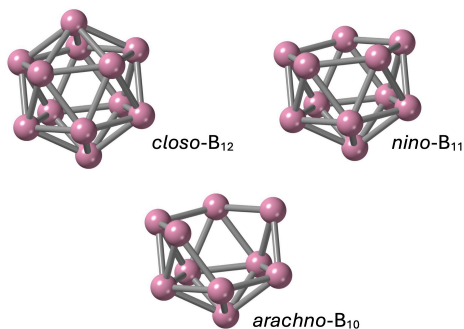
Klastrové sloučeniny *closo*-B_n mají tvar deltaedru s *n* vrcholy, přičemž na každém vrcholu je jeden atom boru a hrany tvoří vazby B-B. Klastrové sloučeniny *nido*-B_n mají stejnou geometrii jako sloučeniny *closo*-B_{n+1}, ale s jedním odstraněným vrcholem. Klastrové sloučeniny *arachno*-B_n odpovídají sloučeninám *nido*-B_{n+1}, ale s dalším odstraněným vrcholem.

Obecně se při přechodu ze struktury *closo* do struktury *nido* odstraňuje atom boru s nejvyšším počtem vazeb. Při přechodu ze struktury *nido* do struktury *arachno* se odstraní sousední bor atomu boru, který byl již odstraněn. Například struktura *closo*-B₁₂ je ikosaedr, struktura *nido*-B₁₁ je ikosaedr s jedním odstraněným vrcholem a struktura *arachno*-B₁₀ je ikosaedr se dvěma sousedními odstraněnými vrcholy (vizte obrázek).

Kolik různých (symetricky neekvivalentních) poloh atomů boru existuje ve strukturách

a) *closo*-B₅, b) *nido*-B₅ a c) *arachno*-B₅?

Jelikož vodíky v boranech neovlivňují symetrii molekuly, jde o počet různých poloh atomů boru v daných sloučeninách. Jako odpověď uveďte **pouze číslo, struktury není třeba kreslit**.



Řešení:

- a) *closo*-B₅: Struktura je trigonální bipyramida. Tři ekvatoriální atomy boru sdílené oběma pyramidami jsou ekvivalentní a dva atomy boru na vrcholech pyramid (axiální atomy) jsou ekvivalentní.

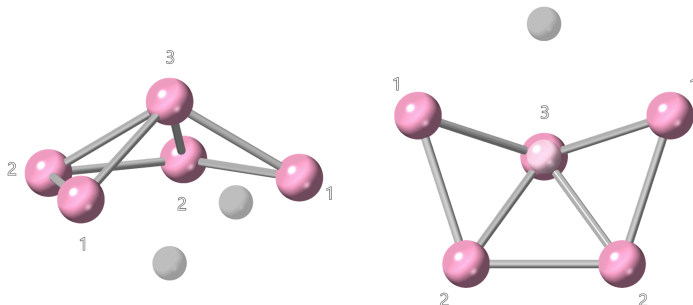
Celkem tedy 2 **neekvivalentní polohy**.

- b) *nido*-B₅: Struktura je oktaedr (ekvivalentní tetragonální bipyramidě) s jedním odstraněným vrcholem, což vytváří tetragonální pyramidu. Čtyři atomy boru na základně jsou ekvivalentní a bor na vrcholu pyramidy má odlišný druh polohy.

Celkem tedy 2 **neekvivalentní polohy**.

- c) *arachno*-B₅: Struktura je pentagonální bipyramida s jedním odstraněným axiálním a jedním odstraněným ekvatoriálním vrcholem, jak je popsáno v zadání. Výsledná struktura má rovinu symetrie procházející dvěma vrcholovými vrcholy (jeden z nich je nyní odstraněn) a odstraněným ekvatoriálním vrcholem. Dva ekvatoriální atomy bóru sousedící s odstraněným ekvatoriálním atomem jsou ekvivalentní a zbývající dva ekvatoriální atomy jsou také ekvivalentní (viz obrázek níže, kde je struktura znázorněna ze dvou různých pohledů: zepředu a zespodu).

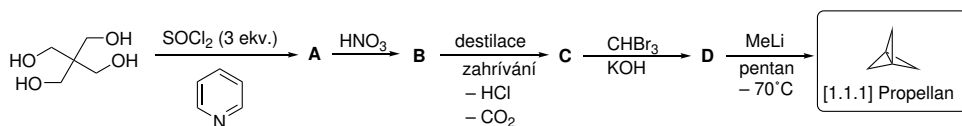
Celkem tedy 3 **neekvivalentní polohy**.



Úloha L.5 (Ondra Daněk): Malá vrtulka

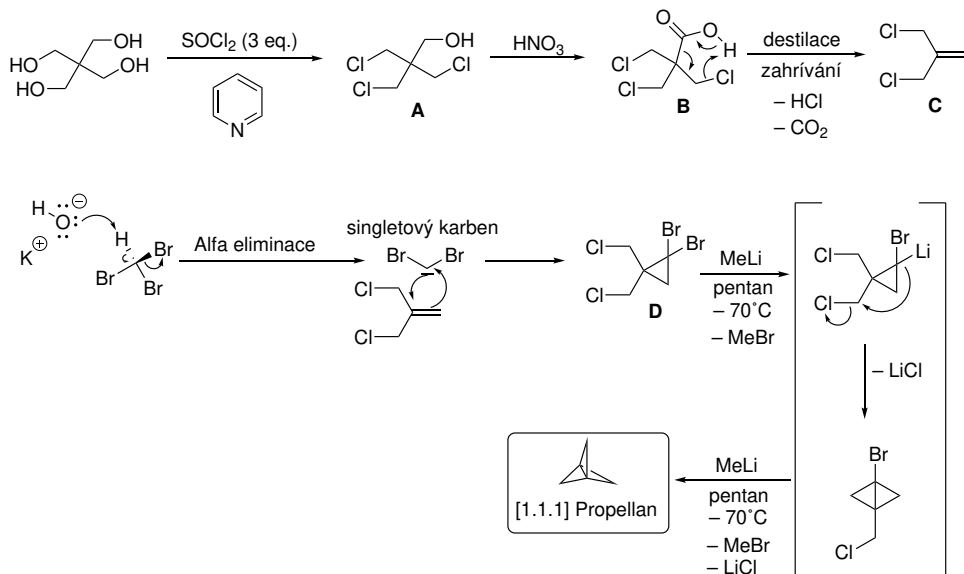
[1.1.1]Propelan je vysoce napjatý uhlovodík, který je zajímavý v mnoha ohledech, z nichž jedním je jeho potenciální využití pro zavedení [1.1.1]bicyklopentanového (BCP) motivu do sloučenin podobných léčivům, kde BCP může působit jako biozoster para substituovaného benzenového kruhu.

Syntéza [1.1.1]propelanu vycházejícího z pentaerytritolu je popsána v následujícím schématu. Nejprve se pentaerytritol zpracuje se třemi ekvivalenty thionylchloridu a pyridinem jako bází. Hlavní produkt této reakce, **A**, se pak oxiduje kyselinou dusičnou a výsledný produkt **B** se během destilace rozkládá na produkt **C**, CO_2 a HCl . Izolovaný produkt **C** se poté ošetří bromoformem a koncentrovaným vodným roztokem KOH , čímž v baňce vznikne tmavý dehet, z něhož lze izolovat produkt **D**. Nakonec lze **D** převést na [1.1.1]propelan reakcí s metyllitiem v pentanu při teplotě -70°C . Nakreslete struktury meziproductů **A-D**.



Řešení:

Aby zbytek syntézy dával smysl, musí se za chlor vyměnit v prvním kroku pouze tři ze čtyř OH skupin pentaerythritolu, což lze vyčíst také z toho, že byly použity tři ekvivalenty thionylchloridu. Poslední zbylá OH skupina v **A** je pak oxidována kyselinou dusičnou na příslušnou karboxylovou kyselinu. Rozklad **B** na **C** lze vysvětlit pericyklickým mechanismem zakresleným ve schématu řešení. Dvojná vazba v **C** podléhá v přítomnosti in-situ generovaného dibromkarbenu cyklopropanaci, čímž vzniká **D**. Při reakci s methyllithiem pak nejprve dochází k výměně kovu za halogen s reaktivnějším halogenem (bromem) a vzniklé alkyllithium zakreslené v hranatých závorkách se rychle cyklickuje intramolekulární S_N2 substitucí s chlorem jako odstupující skupinou. Celá tato kaskáda se potom opakuje znovu s druhým atomem bromu a vzniká tak finální [1.1.1]propellan.

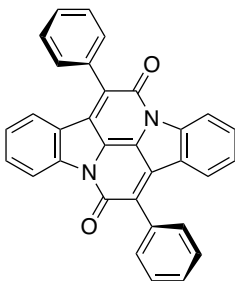


Praktické provedení celé této syntézy spolu s jednou další reakcí [1.1.1] propellanu můžete vidět v tomto videu na youtube: <https://youtu.be/iT1RvQuIyqE>

Úloha L.6 (Saša Zaykov): Barevná

Chemička Anička se rozhodla si nasyntetizovat rudou fluoreskující barvu. I tu v literatuře celkem staré našla zmínku o „Cibalackrotu“, který prvně vytvořil Gadiant Engi pro švýcarskou firmu Ciba. I proto, že se barva byla bývala používala na nátěr rychlých vozů, syntéza zdála se to být celkem snadná – z indiga šlo barvičku vytvořit ve dvou krocích.

Chemikovi Jardíkovi se však nepozdává, že by tato látka měla být červená. Povídá: „Vždyť indigo je modrofialové. A tadyhle jsme tomu přivařili jen dvě vytočené fenylóvé plácačky, které ani nepřispívají do konjugace. To přece nemůže udělat takový rozdíl!“



Aničce, znalé temných zákoutích kvantové chemie, se rozzáří oči a rozhodne se Jardíkovi hypotézu vyzkoušet. Ví, že elektrony, které absorbují světlo, se budou relativně volně pohybovat po π -systému této barvičky. Souhlasí však s Jardíkem, že fenylly se na konjugaci podílet nebudou.

I pokračuje v analýze: „Do π -systému bude každá dvojná vazba přispívat po 2 elektronech a atomy dusíku též po 2. Ty fenylly vynecháme. A protože je jinak molekula planární, půjde volný pohyb elektronů aproximovat pomocí obdélníkové dvojdimenzionální nekonečně hluboké potenciálové jámy.“

„Jáma? A jak bude veliká?“ ptá se nechápavě Jardík.

„Nu, tuhle délku,“ povídá Anička a ukazuje na obrázku delší stranu molekuly jdoucí zleva doprava skrze prostřední dvojnou vazbu, „nazvu třeba x . Odhadla bych si ji pomocí toho, že znám délku vazby mezi uhlíky v benzenu $1,4 \text{ \AA}$. Vzdálenost mezi hranou benzenu a vrcholem vedlejšího pyrrolidinového cyklu je zhruba 1,5 násobek délky benzenové vazby.“

A dál sype: „A, no, ta prostřední dvojná vazba je ekvivalentní té benzenové, tedy $1,4 \text{ \AA}$, protože je určitě delokalizovaná.“

Jardík se už trošku chytá a přiřazuje otázku, „A co ta druhá dimenze?“

Anička na to mávne rukou a praví: „To bude tak půlka té delší a budu jí říkat y . A ještě bych pro jistotu obě strany protáhla tak o 5%. Přeci jen se nám ten elektron nezastaví na konci molekuly.“ Pak už jen Anička vesele črtá řešení Schrödingerovy rovnice pro částice s hmotností m uvězněné ve 2D jámě a sepisuje energii elektronových stavů:

$$E(n_x, n_y) = \frac{h^2}{8m} \times \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right)$$

kde L jsou jednotlivé délky jámy; n jsou kvantová čísla stavů, obdobná jako v případě atomových orbitalů.

Řešením tohoto problému Anička získává posloupnost stavů, kterou si vyznačuje do diagramu a obsazuje tyto „orbitály“ pomocí známých principů. Nezapomíná též, že elektron má dva různé spinové stavy. Absorpcí světla se pak myslí přechod elektronu z jakéhokoli jednoho stavu do stavu druhého pomocí energie zprostředkované balíčkem světla, fotonem. Rozdíl energií těchto elektronových stavů bude pak absorbovaná vlnová délka. Při tomto přechodu (excitaci) se však smí měnit pouze jedno kvantové číslo.

Při jaké vlnové délce [nm] viditelného světla bude molekula cibalackrotu absorbovat dle tohoto modelu?

Řešení:

Nejznazší řešení začíná uvědoměním si, že rovnice pro energie jednotlivých vlnových funkcí elektronů se dá zjednodušit na:

$$E(n_x, n_y) = \text{konst.} \times (n_x^2 + 4n_y^2)$$

Z toho získáváme jednoduchý předpis úměrnosti energie vůči kvantovým číslům, který můžeme sepsat do tabulky:

	$L_x = 1$	$L_x = 2$	$L_x = 3$	$L_x = 4$	$L_x = 5$	$L_x = 6$	$L_x = 7$
$L_y = 1$	5*	8*	13*	20*	29*	40*	53
$L_y = 2$	17*	20*	25*	32*	41*	52	65
$L_y = 3$	37*	40*	45	52	61	72	85
$L_y = 4$	65	68	73	80	89	100	113

Zároveň víme, že v centrální části cibalackrotu (té části bez fenylů) se nachází 13 párů π -elektronů.

Podíváme-li se do tabulky, zjistíme, že zjistíme, že poslední obsazený orbital bude mít kvantová čísla (5,2). Hned nad ním se nachází orbital (3,3). První orbital, u kterého se mění právě jedno kvantové číslo, a přechod z nějž je tedy povolený, je orbital (2,3). Druhý takový orbital je (1,3). Nyní zbývá pouze získat délku molekuly cibalackrotu v ose x :

$$\begin{aligned}L_x &= 1,05 \times (4 \times \cos(\frac{\pi}{6}) \times 1,4 + 4 \times 1,4) \\ &= 1,05 \times (4,84 + 5,6) \\ &\approx 11 \text{ \AA}\end{aligned}$$

Druhá délka je tedy 5,5 Å. Dosazením do původní rovnice získáváme rozdíl energií zhruba 2,18 eV.

$$\begin{aligned}E(2, 3) &= 12,41 \text{ eV} \\ E(3, 3) &= 13,95 \text{ eV}\end{aligned}$$

Požadovanou vlnovou délku pak získáme ze vztahu:

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} \approx 805 \text{ nm}$$

Tato vlnová délka se však nachází mimo viditelné spektrum. Zvolíme tedy přechod (1,3) \rightarrow (3,3) s vyšším energetickým rozdílem a získáváme:

$$\lambda = 496 \text{ nm}$$

Autor seznává, že se v této úloze dopustil značného pišvejcování³. Výsledek, který na poměry teoretické chemie dobře kopíruje experiment⁴, není dílem správnosti a přesnosti této teorie. Jde pouze o dobré „ladění konstant“ a velkou dávku náhody.

³viz Pišvejcova konstanta.

⁴Ryerson, Joseph L., et al. „Structure and photophysics of indigoids for singlet fission: Cibalackrot.“ *The Journal of Chemical Physics* 151.18 (2019). <https://doi.org/10.1063/1.5121863>

Poznámky:

Úlohy vytvořili, sepsali, recenzovali a editovali:

Adam Jaroš	Patrik Lanz
Adam Přáda	Pavína Muchová
Adam Tywoniak	Petr Linhart
Agustin Lorusso	Quyll Pavlakovic
Alexandr Zaykov	Rostislav Huňa
Alexandros Terzopoulos	Sam Holmes
Clare Rees-Zimmerman	Stanislav Chvíla
Daniel Čičovský	Supatpong Juntarawatt
Filip Hůlek	Štěpán Novák
Jakub Sochor	Tadeáš Grabic
Jan Hruběš	Tatiana Nemirovich
Jiří Ledvinka	Terezie Císařová
Lukáš Tabery	Tomáš Heger
Martim Rodrigo Gouveia Pereira	Tomáš Marný
Martin Balouch	Vojtěch Laitl
Martin Nováček	Vít Turčín
Miroslava Novoveská	Yeha Lee
Nathaniel Loh	Zev Armour-Garb
Neil Waterson	Zuzana Hybnerová
Ondřej Daněk	Zuzana Zápotocká

Na přání většiny spoluautorů nejsou uvedeny jejich akademické tituly.

Sázeno s pomocí X_YL^AT_EX za použití balíčku `natsci` od Adama Přády:
<https://github.com/adamprada/natsci>

Poděkování

Desátý ročník soutěže Chemiklání byl pořádán:

- Fakultou chemicko-technologickou Univerzity Pardubice,
- Yusuf Hamied Department of Chemistry, University of Cambridge,
- Institute of Science and Technology Austria
- Rugby School
- a zapsaným spolkem Alumni scientiae Bohemicae

s podporou Explosia, a.s., Zentiva Group, a.s., a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.



<https://fcht.upce.cz/>



<https://www.ch.cam.ac.uk/>



<http://chemistryrace.com/>



<https://ista.ac.at/>



RUGBY SCHOOL

<https://www.rugbyschool.co.uk/>



<http://www.czechscience.cz/>



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

<https://msmt.gov.cz/>



<https://explosia.cz/>



<https://www.zentiva.cz/>

Případné chyby hlašte prosím na chemiklani@chemiklani.cz.

Pro více informací navštivte
<http://chemiklani.cz/>

Úlohy jsou publikovány pod licencí Creative Commons Uvedte původ-Neužívejte dílo komerčně-Zachovejte licenci 4.0 Česká republika (CC BY-NC-SA 4.0 CZ).

<http://chemiklani.cz/>