



60. ročník

2023/2024

NÁRODNÍ KOLO

Kategorie A/E

Teoretická část – Zadání

240 univerzálních bodů (60 bodů kat. A, 40 bodů kat. E)

210 minut (3,5 hod)



Vzorečkovník, důležité konstanty a převody jednotek

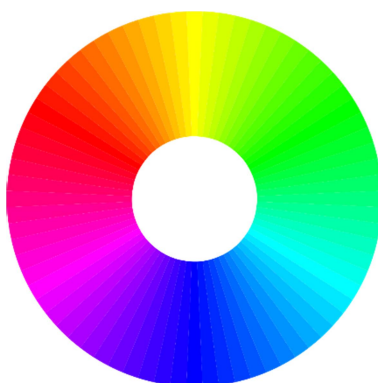
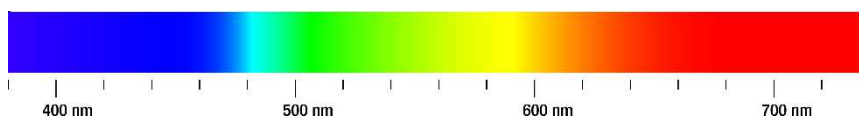
1. Energie fotonu	$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$
2. Definice absorbance	$A = -\log \tau = -\log \frac{I}{I_0}$
3. Lambertův–Beerův zákon	$A_\lambda = \varepsilon_\lambda \cdot c \cdot l$
4. Aditivita absorbance	$A = \sum A_i = A_1 + A_2 + A_3 + \dots$
5. Rovnice fotoelektrického jevu	$h\nu = W + E_k$
6. Počet vibračních módů lineárních molekul	$3N - 5$
7. Počet vibračních módů nelineárních molekul	$3N - 6$
8. Frekvence fundamentálního vibračního přechodu	$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$
9. Redukovaná hmotnost	$\mu = \frac{m_a \cdot m_b}{m_a + m_b}$
10. Energetické hladiny harmonického oscilátoru	$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot h\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots$
11. Kinetická energie	$E_k = \frac{1}{2}mv^2$
12. Definice pH	$\text{pH} = -\log [\text{H}^+]$
13. Stavová rovnice ideálního plynu	$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$
14. Rovnovážná konstanta reakce $r\text{R} \longrightarrow p\text{P}$	$K = \frac{a_{\text{P}}^p}{a_{\text{R}}^r} \approx \frac{[\text{P}]^p}{[\text{R}]^r}$
15. Přenesené teplo	$\Delta Q = c_m \cdot n \cdot \Delta T$
16. Obvod a obsah kruhu	$o = 2\pi r \quad S = \pi r^2$
17. Povrch a objem koule	$S = 4\pi r^2 \quad V = \frac{4}{3}\pi r^3$
18. Avogadrova konstanta	$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
19. Atomová hmotnostní konstanta	$m_u = 1 \text{ amu} = 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$



20. Hmotnost elektronu $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
21. Elektronvolt $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
22. Planckova konstanta $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
23. Rychlost světla ve vakuu $c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$
24. Univerzální plynová konstanta $R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
25. Termodynamická teplota $0 \text{ }^\circ\text{C} = 273,15 \text{ K}$
26. Standardní tlak $p_{\text{std}} = 101\,325 \text{ Pa} = 1 \text{ atm} = 760 \text{ Torr}$
27. Standardní teplota $T_{\text{std}} = 298,15 \text{ K}$

Tabulka: Oblasti vlnových délek viditelného záření a komplementární barvy.

Vlnová délka (nm)	Barva	Komplementární barva
380–460	fialová	žlutá
460–495	modrá	oranžová
495–570	zelená	červená
570–590	žlutá	fialová
590–620	oranžová	modrá
620–750	červená	zelená



**ANORGANICKÁ CHEMIE****60 BODŮ****Úloha 1 Fluor a jeho interhalogeny****15 bodů**

Fluor, jak již bylo v předchozích kolech zmíněno, se chová z chemického hlediska dosti odlišně od ostatních halogenů. Jedná se o prvek s nejvyšší elektronegativitou, a zároveň o prvek, který je vůbec nejreaktivnější. Velmi malá energie vazby umožňuje snadnou disociaci molekuly F_2 a způsobuje velkou reaktivitu fluoru.

1) Uvedte hlavní důvod, proč je energie vazby v molekule fluoru tak nízká.

Odpověď:

body:

Pokud nyní lehce odbočíme od interhalogenů k halogenidům síry, fluor má i zde, na rozdíl od ostatních halogenů, výsadní postavení.

2) Napište vzorce existujícího fluoridu a chloridu síry v nejvyšším oxidačním stavu a vysvětlete tento rozdíl v chování chloru a fluoru k síře.

Vzorce:

Vysvětlení:

body:

V předchozích kolech již bylo zmíněno pár informací o interhalogenových sloučeninách. Fluor interhalogenů vytváří nejvíce, od ClF až po IF_7 .

3) Pomocí konceptu elektronegativity a atomového poloměru vysvětlete, proč má fluor tendenci vytvářet interhalogenové sloučeniny ochotněji než ostatní halogeny.

Odpověď:

body:



- 4) Proč nemůže být fluor v interhalogenech centrálním atomem, tj. proč existuje např. ClF_5 , ale nikoliv FCl_5 ? Uveďte dva hlavní důvody.

Odpověď:

body:

Pojďme se podívat na tři nejjednodušší interhalogeny fluoru, totiž ClF , BrF a IF .

- 5) Uvažujeme-li reakce s iontovým mechanismem, budou tyto interhalogeny reaktivnější nebo méně reaktivní než molekula Cl_2 ? Zdůvodněte.

Odpověď:

Zdůvodnění:

body:

- 6) Který ze tří výše uvedených interhalogenů bude tepelně nejstálější? Zdůvodněte.

Odpověď:

Zdůvodnění:

body:



Reaktivita interhalogenů se stejným centrálním atomem se v závislosti na počtu atomů fluoru mění. Příkladem může být odlišná hydrolýza interhalogenů ClF , ClF_3 , ClF_5 . Zatímco ClF ve vodě reaguje obdobně jako chlor ve vodě, ClF_3 poskytuje hydrolýzou kyseliny obou prvků a kyslík. ClF_5 hydrolýzou poskytuje jako jeden z produktů fluorid chlorylu.

7) Napište vyčíslené rovnice popisující výše popsané hydrolýzy interhalogenů chloru s fluorem.

Rovnice:

(1) ClF

(2) ClF_3

(3) ClF_5

body:

**Úloha 2 Oxidy chloru****11 bodů**

Oxid chlorný je za normálních podmínek plyn tvořený molekulami se sumárním vzorcem Cl_2O . Přestože se jedná o molekulu strukturně podobnou molekule vody, je ve struktuře Cl_2O větší vazebný úhel (111°), než by odpovídalo jeho ideální struktuře podle teorie VSEPR ($109,5^\circ$) a zároveň jsou vazby $\text{Cl}-\text{O}$ o něco kratší, než odpovídá jednoduché vazbě.

1) Nakreslete strukturní elektronový vzorec rezonanční struktury Cl_2O s nejmenší energií.

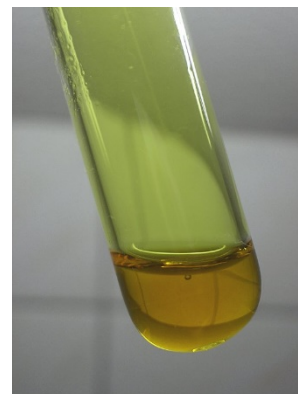
Strukturní elektronový vzorec:

body:

Oxid chloričitý, ClO_2 je rovněž plyn, konkrétně žlutozelené barvy, který se ve vodě rozpouští na žlutozelený roztok. Používá se jako vynikající prostředek na desinfekci vody, bělení papíru a další hrubé desinfekce a bělení.

Někteří jedinci ho cíleně požívají nebo se v jeho vodném roztoku (tzv. CDS) koupou, protože věří, že má selektivní biocidní účinky na covid-19, HIV, původce veškerých virových, bakteriálních, či mykotických chorob, nicméně ostatní buňky nechává bez povšimnutí žít. Konkrétně je možné nalézt návody na domácí přípravu roztoků ClO_2 z chloritanu sodného a hydrogensíranu sodného s obsahem 250–500 ppm hm. ClO_2 .

Oxid chloričitý je zajímavý rovněž tím, že je tvořen paramagnetickými molekulami, které nejeví sklon k dimerizaci (oproti např. NO_2).



Oxid chloričitý

2) Nakreslete strukturní elektronový vzorec ClO_2 .

Strukturní elektronový vzorec:

body:**3) Popište vyčíslenou chemickou rovnicí přípravu ClO_2 z chloritanu sodného a hydrogensíranu sodného.**

Rovnice:

body:

**4) Vysvětlete, proč ClO_2 (na rozdíl od NO_2) nejví sklon k dimerizaci.**

Vysvětlení:

body:

Reakcí oxidu chloričitého s ozonem je možné připravit oxid chlorový $\text{ClO}_3/\text{Cl}_2\text{O}_6$. V plynném stavu se jedná o bezbarvý plyn, nicméně v kapalném a pevném stavu se jedná o červenou látku, což svědčí o tom, že v kondenzované fázi přechází na iontovou formu. Jeho hydrolýzou se získá směs kyseliny chlorečné a chloristé.

5) Napište strukturní elektronový vzorec ClO_3 a rozhodněte, zda se jedná o paramagnetickou, či diamagnetickou molekulu.

Strukturní elektronový vzorec:

Molekula ClO_3 je ☐ paramagnetická
☐ diamagnetická

body:**6) Zapište strukturní elektronový vzorec kovalentní a iontové formy Cl_2O_6 . U iontové formy uveďte i správný systematický název.**

Strukturní elektronový vzorec kovalentní formy:

Strukturní elektronový vzorec iontové formy:

Systematický název iontové formy:

body:

**Úloha 3 Na stopě jedné z méně známých binárních sloučenin jodu****15 bodů**

Jod s kyslíkem za normálních podmínek nereaguje. Pokud však ponecháme reagovat jod s ozonizovaným kyslíkem v tetrachlormethanu při teplotě suchého ledu (**reakce 1**), obdržíme světle žlutou látku **A**, která má složení I_2O_2 . Tato kovalentní látka je zajímavá tím, že její molekula obsahuje dva různé typy atomů jodu v rozdílných kladných oxidačních stavech.

0,1500 g látky **A** reaguje s okyseleným roztokem jodidu (**reakce 2**) a vzniká roztok jodu, na jehož redukci se spotřebuje 25,32 ml 0,2000M roztoku thiosíranu sodného. Tepelný rozklad 0,1500 g **A** (**reakce 3**) vede k poklesu hmotnosti o 22,9 % za vzniku oxidu jodičného a plynné směsi látek **B** a **C** o objemu 14,17 ml (při teplotě 600 K a tlaku 101 325 Pa). Zchlazením na laboratorní teplotu dojde ke kondenzaci/depozici jedné plynné složky a zbývající plyn **C** zaujímá za standardních podmínek objem 4,22 ml.

1) Identifikujte látky B, C a A.

Úvahy a výpočty:



B:

C:

A:

body:

(Za bodovou ztrátu 8 bodů lze od organizátorů obdržet sumární vzorec **A**).

2) Napište vyčíslené chemické rovnice reakcí 1, 2 a 3.

Rovnice **reakce 1**:Rovnice **reakce 2**:Rovnice **reakce 3**:

body:

3) Napište strukturní elektronový vzorec látky A a k jednotlivým atomům jodu v její struktuře uveďte oxidační čísla.

Strukturní elektronový vzorec:

body:

**Úloha 4 Hledá se prvek X a sůl Y****19 bodů**

Rozpouštěním 39,4 mg prvku **X** ve směsi koncentrované kyseliny dusičné a chlorovodíkové v mol. poměru 3 : 4 (**reakce 1**) dochází ke vzniku žlutého roztoku jednosytné kyseliny **A** a vývoji dráždivého oranžovohnědého plynu **B**. Přídavkem nasyceného roztoku KCl k roztoku kyseliny **A** (**reakce 2**) a volnou krystalizací vzniklého roztoku obdržíme sůl **Y**. Rozpouštěním soli **Y** v nadbytku roztoku KI (**reakce 3**) obdržíme roztok jodu, na jehož redukci se spotřebuje 12,40 ml 0,1000M roztoku thiosíranu sodného.

Sůl **Y** se působením acetonu rozkládá na žlutý roztok látky **C** a v acetonu nerozpustný zbytek, který byl identifikován jako KCl (22,88 % hm. soli **Y**).

Tepelný rozklad 10,00 mg soli **Y** (**reakce 4**) vede k vývoji plyných složek **D** a **E** (složka **E** kondenzuje za pokojové teploty na bezbarvou kapalinu, naopak **D** nekondenzuje a má zelenožluté zbarvení) za současného vzniku 7,28 mg nestabilní soli **F**.

Sůl **F** se působením acetonu rovněž rozkládá. Vzniká oranžovočervený roztok látky **G** a opět KCl nerozpustný v acetonu (31,47 % hm. soli **F**).

Sůl **Y****1) Identifikujte prvek X, kyselinu A a plyn B.**

Výpočty a úvahy:

**X:****A:****B:****body:**

2) Identifikujte sůl Y. (Za bodovou ztrátu odpovídající otázkám 1) a 2) je možné si vyžádat vzorec látky Y).

Výpočty a úvahy:

Y:**body:**

**3) Napište vyčíslené chemické rovnice reakcí 1–3.**Rovnice **reakce 1:**Rovnice **reakce 2:**Rovnice **reakce 3:****body:****4) Identifikujte látky C, D a E.**

Výpočty a úvahy:

C:**D:****E:****body:**



- 5) **Identifikujte sůl F a látku G.** (Za bodovou ztrátu odpovídající otázkám 4) a 5) je možné vyžádat si vzorec látky F).

Výpočty a úvahy:

F:

G:

body:

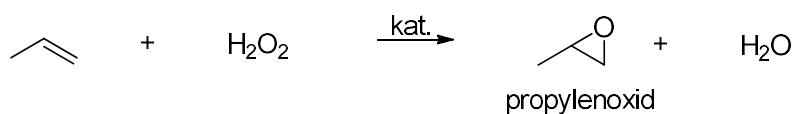
- 6) **Napište vyčíslenou chemickou rovnici reakce 4.**

Rovnice **reakce 4:**

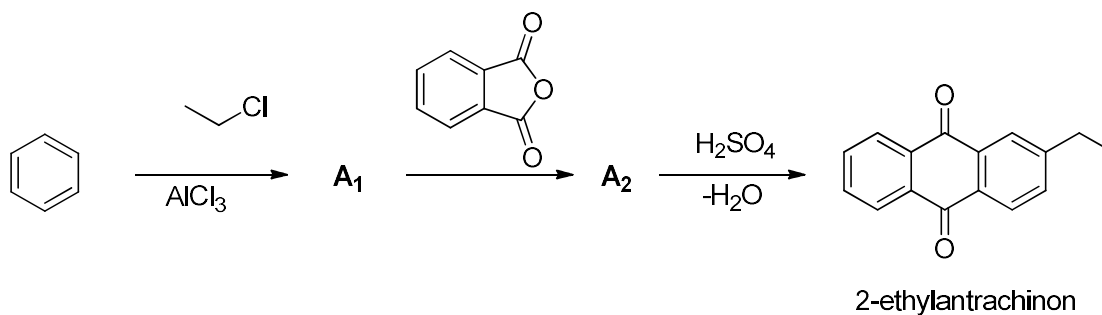
body:

**ORGANICKÁ CHEMIE****60 BODŮ****Úloha 1 Propylenoxid****19 bodů**

V organické technologii se kvůli environmentálním tlakům snažíme využívat stále zelenější technologie. V ideálním případě by z takové zelené technologie měl vycházet jen námi požadovaný produkt a žádný odpad. Jednou z takových technologií je výroba propylenoxidu (epoxypropanu), kdy se využívá přímá oxidace propenu peroxidem vodíku. Jediným odpadním produktem je voda, která je využita při parním reformování zemního plynu k získání vodíku. Vodík následně opět využijeme jako surovinu pro reakci.



Na syntézu propylenoxidu budeme potřebovat peroxid vodíku. Abychom ho získali, musíme nejprve vyrobit 2-ethylantrachinon (2-ethylantracen-9,10-dion), a to podle následujícího schématu.

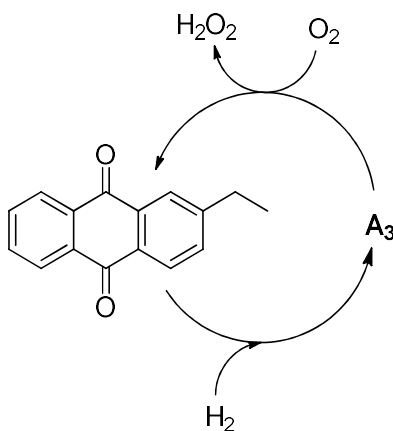


1) Nakreslete struktury A₁ a A₂.

body:



Peroxid vodíku se pak získá podle následujícího schématu:



2) Uveďte strukturu A₃.

body:

Získaný peroxid vodíku můžeme využít při výrobě propylenoxidu.



Jako epoxidační katalyzátor se využívají křemičitany titanu. Křemičitany ovšem mají jeden nedostatek, a to přítomnost kyselých center. Kyselá centra výborně katalyzují nežádoucí reakci, a proto je nezbytné je neutralizovat přidávkou amoniaku.

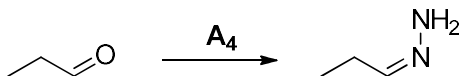
3) Uveďte reakci (popis nebo schéma), která by nastala, kdyby nebyla kyselá centra křemičitanů neutralizována.

Reakce:

body:



Jednou z nečistot, která při epoxidaci vzniká, jsou aldehydy. Ty je nezbytné odstraňovat, například podle následující rovnice.

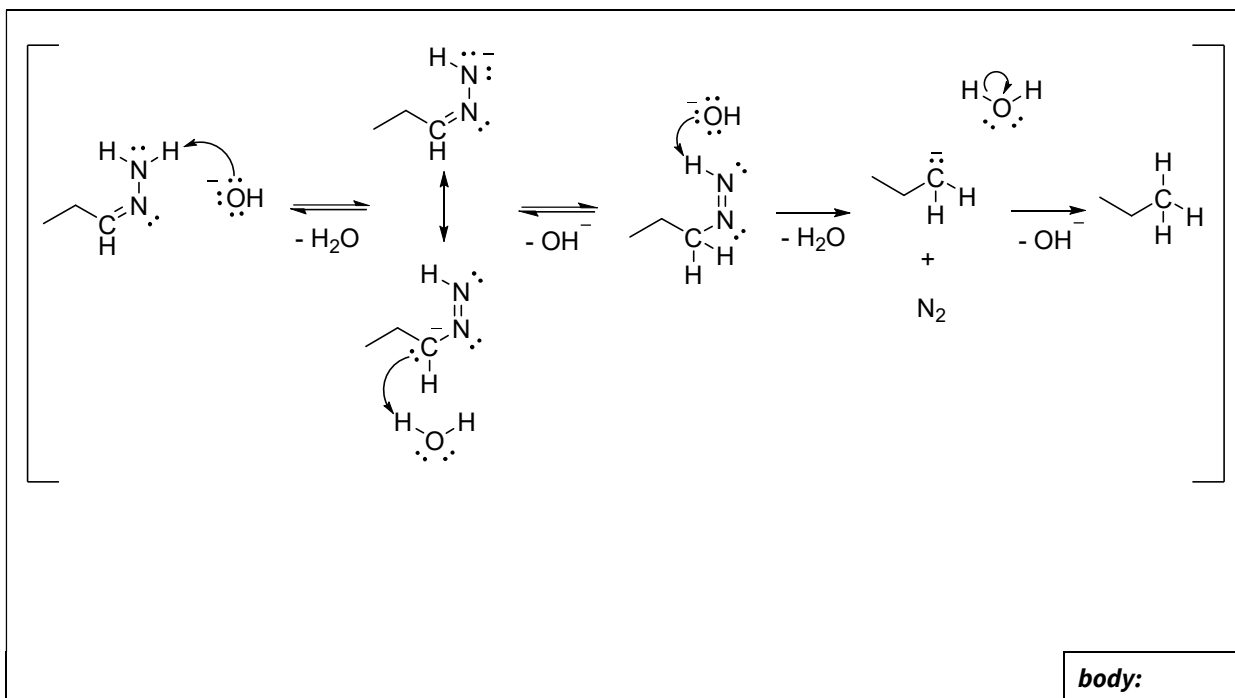


- 4) Jaké činidlo **A₄** využíváme pro výše uvedenou reakci? Uveďte jeho název a vzorec. Jak se obecně nazývá produkt reakce?

body:

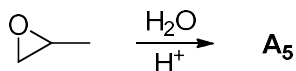
Produkty reakce s činidlem **A₄** můžeme v zásaditém prostředí zcela redukovat až na alky (Wolfova–Kižněrova reakce). V prvním kroku báze odtrhne proton. Vzniklý anion tvoří dvě rezonanční struktury. Jedna z rezonančních struktur nese záporný náboj na atomu uhlíku. Uhlík se záporným nábojem je v dalším kroku protonován za vzniku neutrálního produktu. Následně je působením báze deprotonován slabě kyselý vodík. Vzniká karbanion, jehož protonací vzniká alkan.

- 5) Do reakčního schématu doplňte šipky pohybu elektronových párů (některé šipky jsme již doplnili za vás).





Čistý propylenoxid následně využíváme pro velkoobjemové výroby. Jednou z nich je reakce propylenoxidu s vodou v kyselém prostředí.



- 6) Zakreslete strukturu A_5 a zakroužkujte atom kyslíku, který byl původně součástí molekuly propylenoxidu.

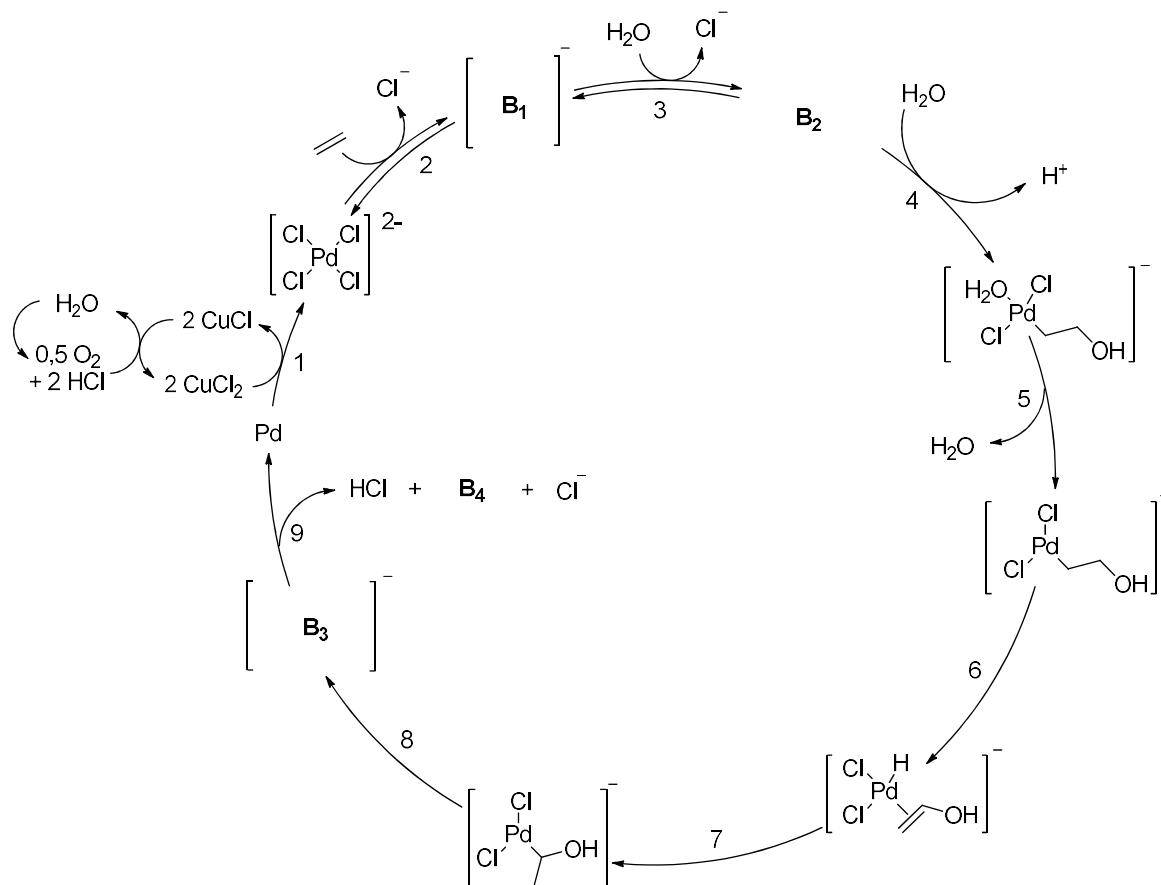
body:



Úloha 2 Cyklus počtvrté (a naposledy)

22 bodů

Následující schéma zobrazuje tzv. Wackerův proces. I když je tento proces dlouhá léta studován, stále není jeho úplný mechanismus zcela objasněn.



Do reakce vstupuje ethen a kyslík. Z reakce vystupuje z 95 % jediný produkt **B₄**.

Tetrachloridopalladatanový anion reaguje v kroku 2 s ethenem a současně dochází k odštěpení chloridového aniontu. Následně dochází ve třetím reakčním kroku k reakci s vodou a opětovnému odštěpení chloridového aniontu.

1) Nakreslete struktury meziproduktů **B₁** a **B₂**. U atomů palladia uveďte jejich oxidační stav.

body:

**2) Přiřadte níže uvedené názvy elementárních reakcí k jednotlivým krokům katalytického cyklu.**Reduktivní eliminace, disociace, β -eliminace, inserce, oxidativní adice, koordinace, transmetalace.

Krok č. 1	
Krok č. 2 (kombinace 2 elementárních reakcí)	
Krok č. 3 (kombinace 2 elementárních reakcí)	
Krok č. 4 (kombinace 2 elementárních reakcí)	
Krok č. 5	
Krok č. 6	β -eliminace a koordinace
Krok č. 7	
Krok č. 8	β -eliminace hydridu a koordinace
Krok č. 9	

body:

Reakční krok číslo 8 probíhá jako β -eliminace hydridu. V tomto kroku dochází k přenosu hydridu na centrální atom palladia.

3) Zakreslete strukturu komplexu B₃.

body:

4) Zapište sumární rovnici reakce, která probíhá při Wackerově procesu.

body:

5) Zakreslete strukturu B₄.

body:

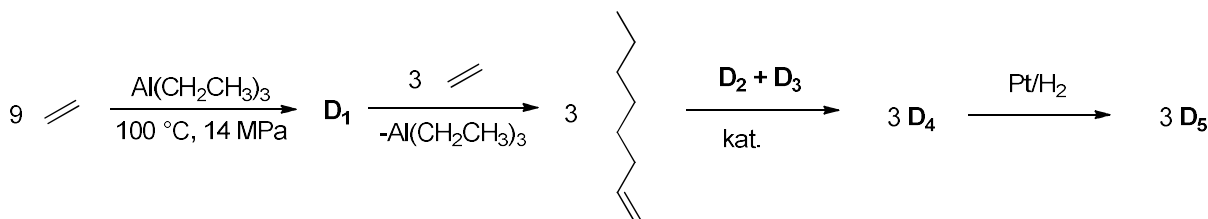


Úloha 3 Změkčovačla

19 bodů

Vlastnosti polymerů závisí na mnoha faktorech a výsledkem polymerace je často tvrdý polymer. Co když ale chceme mít daný polymer měkký? Řešením může být například přidavek změkčovadel, která v některých případech mohou svým obsahem dokonce převyšovat množství polymeru.

V organické technologii bychom pro výrobu změkčovadla vycházeli ideálně ze základních levných surovin, jako jsou ethen nebo naftalen



Reakce ethenu a triethylhliníku probíhá za uvedených podmínek (100 °C, 14 MPa) a vzniká molekula **D₁**.

1) Nakreslete strukturu D_1 .

body:

Po reakci stačí změnit podmínky a působením ethenu dochází ke spolehlivému rozkladu molekuly **D₁** na triethylhliník a okt-1-en.

2) Vyberte, které z uvedených změn povedou k rozkladu molekuly D_1 .

a) Zvýšení teploty	
b) Snížení teploty	
c) Zvýšení tlaku	
d) Snížení tlaku	

body:

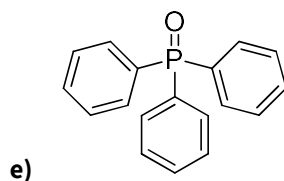
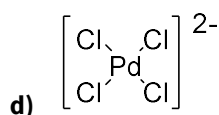
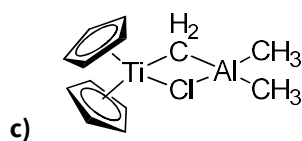
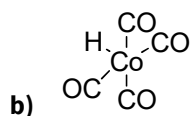
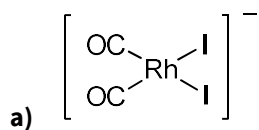
Molekula oktenu je ideální surovinou pro hydroformylaci.

3) Uveďte vzorce surovin potřebných pro hydroformylaci (molekuly D₂ a D₃).

A 2D coordinate system with a horizontal axis labeled D_3 and a vertical axis labeled D_2 . The origin is at the top-left corner. A point labeled *body:* is located in the lower-right quadrant, with dashed lines indicating its coordinates on both axes.



4) Který z níže uvedených katalyzátorů by bylo možné použít pro hydroformylaci?



body:

5) Produktem hydroformylační reakce je jediný produkt **D₄**. Nakreslete strukturu **D₄**.

body:

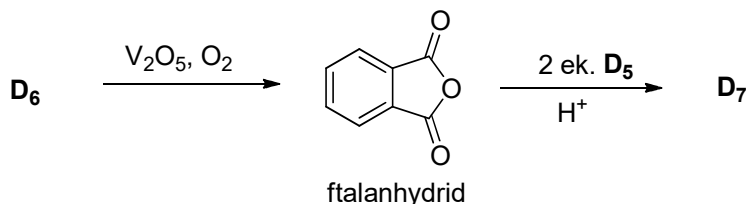
V posledním kroku molekulu **D₄** podrobíme hydrogenační reakci. V tomto případě budou podmínky nastaveny tak, aby jedna molekula **D₄** reagovala právě s jednou molekulou vodíku.

6) Nakreslete strukturu **D₅**.

body:



Druhá část molekuly změkčovačla byla dříve vyráběna oxidací naftalenu. Při oxidaci naftalenu ovšem zbytečně ztrácíme část molekuly ve formě CO_2 . Takový přístup je z pohledu organické technologie nevhodný. Potřebný ftalanhydrid však můžeme vyrobit i oxidací jiné základní suroviny, kdy nebude docházet ke vzniku CO_2 .



- 7) Zakreslete strukturu suroviny D_6 vhodnou k oxidaci na ftalanhydrid (pozor, nejedná se o naftalen).

body:

Při výrobě ftalanhydridu z naftalenu je pro oxidaci jedné molekuly naftalenu potřeba 5,5 molekuly kyslíku.

- 8) Kolik molekul kyslíku je potřeba pro oxidaci jedné molekuly D_6 ?

body:

Změkčovačlo D_7 vzniká reakcí ftalanhydridu se dvěma molekulami D_5 .

- 9) Zakreslete strukturu D_7 .

body:



FYZIKÁLNÍ CHEMIE

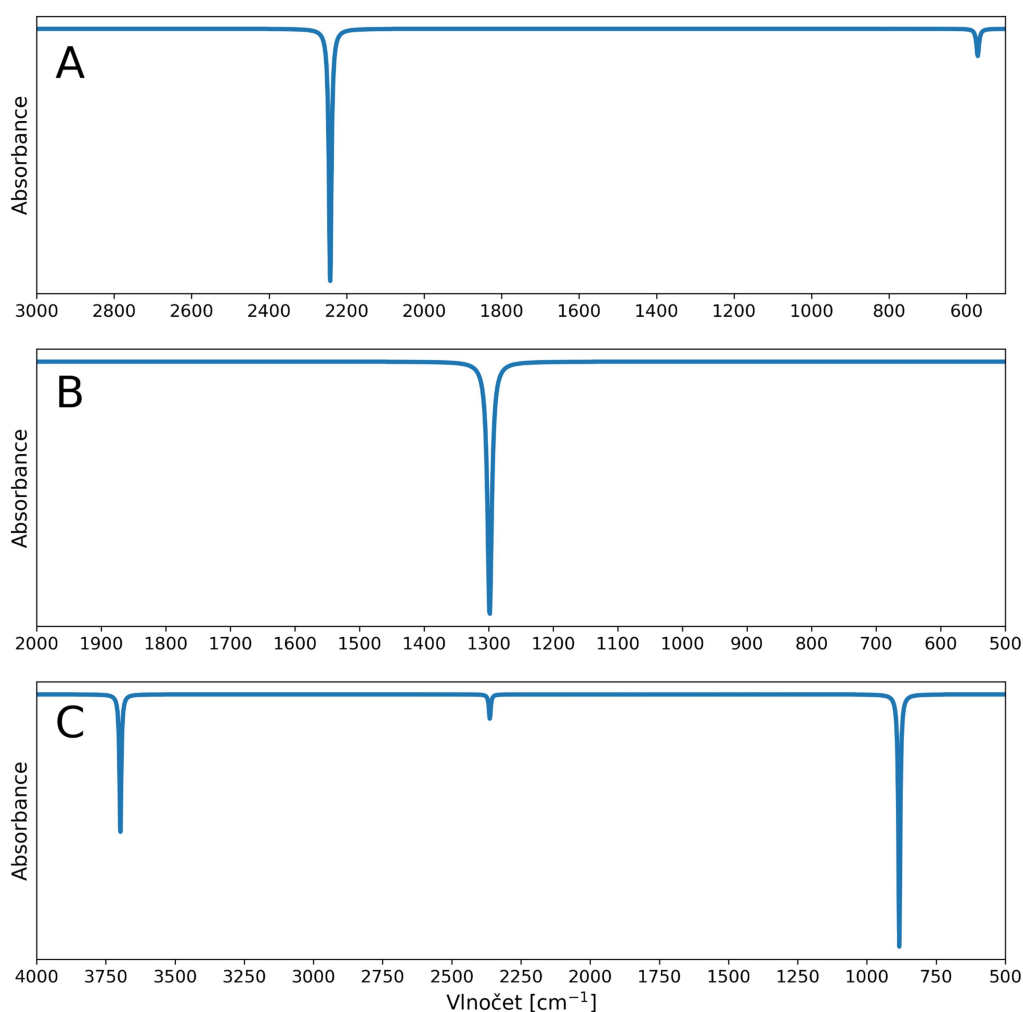
60 BODŮ

Úloha 1 Molekula NO

28 bodů

V předchozích kolech fyzikálně-chemické části jsme se věnovali zejména třem typům spektroskopie – UV-Vis, fotoelektronové a infračervené. Nyní se pokusme všechny nabyté znalosti využít k tomu, abychom „vyřešili“ strukturu a vlastnosti molekuly oxidu dusnatého. Nejprve se zaměříme na informace, které můžeme získat pomocí infračervené spektroskopie.

- 1) Z následujících tří teoreticky predikovaných infračervených spekter vyberte to, které náleží molekule NO. Odpověď zdůvodněte.



Odpověď:

Zdůvodnění:

body:



- 2) Navrhněte molekuly, které by mohly dle počtu a intenzity vibračních pásů odpovídat zbývajícím dvěma spektrům, a odůvodněte proč.

Struktury molekul:

body:

- 3) Vypočítejte silovou konstantu a energii nulového bodu molekuly NO.

Výpočet:

Silová konstanta:

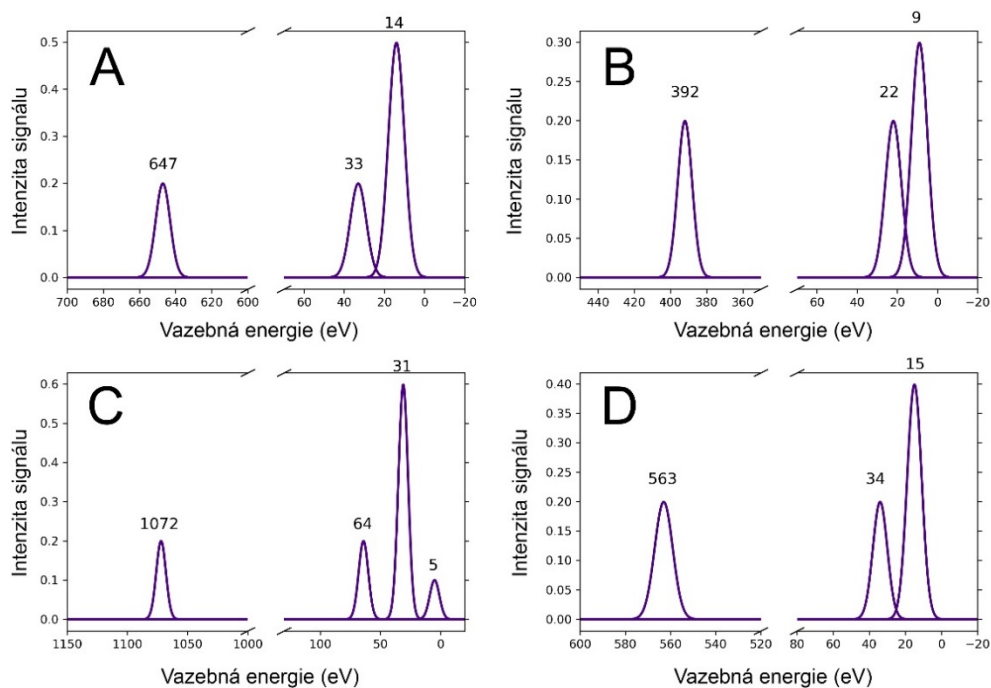
Energie nulového bodu:

body:



Nyní se posuneme k elektronové struktuře oxidu dusnatého.

- 4) Určete, které z níže uvedených fotoelektronových spekter odpovídá atomu dusíku a které atomu kyslíku. Odpověď zdůvodněte.



Odpověď:

Zdůvodnění:

body:

- 5) Vypočítejte rychlost elektronů z 2s orbitalu atomu dusíku a 1s orbitalu atomu kyslíku, pokud byla jako zdroj použita hořčíková lampa vyzařující fotony o energii 1253,6 eV.

Výpočet:

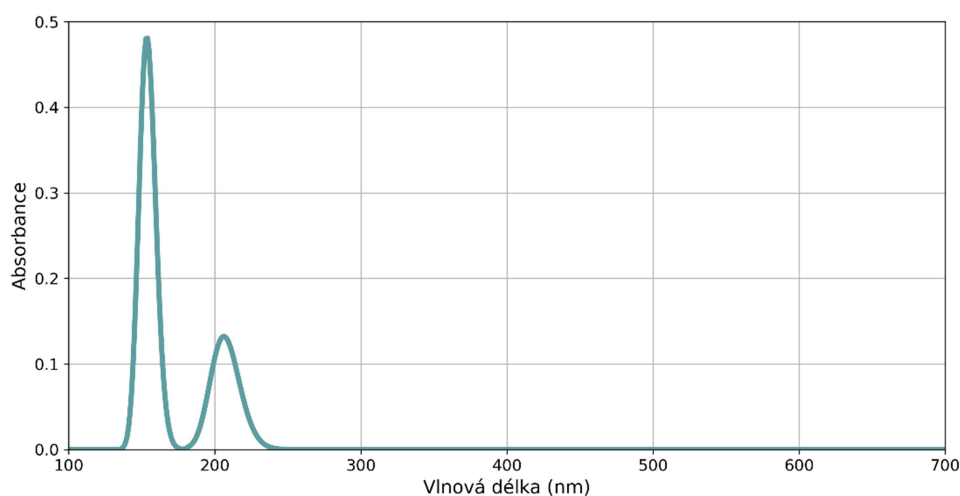
Rychlost elektronů z 2s orbitalu atomu dusíku:

Rychlost elektronů z 1s orbitalu atomu kyslíku:

body:



Fotoelektronové spektrum molekuly NO, které máte k dispozici, je bohužel poškozené a některé informace vám chybí. Máte však k dispozici UV-Vis spektrum této molekuly.



6) Na základě UV-Vis spektra určete, zda je oxid dusnatý barevný. Odpověď zdůvodněte.

Odpověď:

Zdůvodnění:

body:

7) Nakreslete diagram molekulových orbitalů molekuly NO, zakreslete do něj elektrony. Vypočítejte rozdíl energií HOMO a LUMO orbitalů (v eV) a vyznačte jej do diagramu MO oboustrannou šipkou.

Výpočet:

Diagram:

body:

**Úloha 2 Spektrofotometrie krve****10 bodů**

Spektrofotometrie se používá v medicíně například ke zjištění koncentrací hemoglobinu (proteinu, který přenáší kyslík v červených krvinkách) a bilirubinu (odpadního produktu červených krvinek) v krvi. Ty lze pak použít k diagnostice různých nemocí. Hemoglobin má molární absorpční koeficient $54\,520\text{ cm}^{-1}\text{ M}^{-1}$ při vlnové délce 554 nm a $62\,640\text{ cm}^{-1}\text{ M}^{-1}$ při vlnové délce 451 nm. Bilirubin má molární absorpční koeficient $20\text{ cm}^{-1}\text{ M}^{-1}$ při vlnové délce 554 nm a $55\,000\text{ cm}^{-1}\text{ M}^{-1}$ při vlnové délce 451 nm. Upravený vzorek krve, ze kterého byly nejdříve odstraněny další absorbující látky a který byl následně 1000× zředěn, vykazoval absorbanci 0,138 při 451 nm a 0,118 při 554 nm (pro měření byly použité standardní 1 cm kyvety).

1) Vypočítejte koncentraci bilirubinu a hemoglobinu v původním (neupraveném) vzorku krve.

Výpočet:

Koncentrace bilirubinu:

Koncentrace hemoglobinu:

body:

Obecně platí, že dospělí mají koncentraci hemoglobinu přibližně 13,5–17,5 g/dl. Bilirubin je odpadní produkt a jeho koncentrace v krvi je obvykle velmi nízká, typicky nižší než 1,2 mg/dl u dospělých. Zvýšená hladina bilirubinu může naznačovat poruchy jater nebo krve.

2) Měl by člověk, kterému patří změřená krev, navštívit lékaře? (Molární hmotnost hemoglobinu je přibližně $64\,500\text{ g mol}^{-1}$, molární hmotnost bilirubinu je $584,66\text{ g mol}^{-1}$.)

Výpočet:

Odpověď:

body:



Za barevnost hemu, který je součástí hemoglobinu, může interakce železnatého kationtu s porfyrinovým skeletem, který se na atom železa koordinuje.

3) V jaké oblasti vlnových délek absorbuje porfyrin bez koordinovaného železa, pokud víme, že je modrofialový?

Odpověď:

body:

4) Jak by se musela změnit chemická struktura porfyrinu, aby neabsorboval ve viditelné oblasti spektra?

Odpověď:

body:

**Úloha 3 Složitější vibrace****22 bodů**

V školním kole jsme studovali vibrace jednoduché tříatomové molekuly (oxidu uhličitého). Nyní se podíváme na vibrace trochu složitější čtyřatomové molekuly – molekuly acetyleny.

1) Kolik vibračních módů bude mít molekula acetyleny?

Výpočet:

Odpověď:

body:**2) Nakreslete strukturu acetyleny a naznačte pomocí šipek, jak vypadají jednotlivé vibrační módy.**

Struktury:

body:



3) Které z vámi nalezených vibračních módů uvidíme v infračerveném spektru? Odpověď zdůvodněte.

Odpověď:

Zdůvodnění:

body:

4) Které vibrační módy budou degenerované (energeticky identické)? Odpověď zdůvodněte.

Odpověď:

Zdůvodnění:

body:

5) Kolik píků tedy celkem uvidíme v infračerveném spektru? Odpověď zdůvodněte.

Odpověď:

Zdůvodnění:

body:

**BIOCHEMIE****60 BODŮ****Úloha 1 Hemoproteiny a radikály****35 bodů**

Hemoproteinové peroxidasy jsou třídou enzymů, které úzce souvisejí s reaktivními formami kyslíku. Peroxidasas se mimo jiné vyskytují ve velkém množství v křenu.

- 1) Napište vyčíslenou reakci oxidace hydrochinonu (1,4-benzendiolu) peroxidem vodíku katalyzovanou křenovou peroxidasou.

Rovnice:

body:

- 2) Křenová peroxidasa je reverzibilně inhibovaná kyanidy a sulfidy v koncentracích již v řádu $10^{-5} \text{ mol dm}^{-3}$. Jaký je mechanismus této inhibice?

Odpověď:

body:

- 3) Přestože hemoglobin a křenová peroxidasa mají mnoho společného, liší se mimo jiné jednou podstatnou věcí týkající se iontu železa při funkci samotného enzymu. Jakou?

Odpověď:

body:



Křenová peroxidasa se pro vysokou aktivitu a značnou stabilitu používá i v řadě jiných aplikací. Jednou z nich je například spektrofotometrické stanovení peroxidu vodíku na *o*-dianisidin. Peroxid vodíku v přítomnosti peroxidasy kvantitativně stechiometricky (1:1) oxiduje *o*-dianisidin na barevný produkt, který má molární absorpční koeficient $11\,300\text{ dm}^3\text{ mol}^{-1}\text{ cm}^{-1}$.

- 4) Reakční směs byla připravena z 10 mg *o*-dianisidindihydrochloridu, 18,6 mg EDTA (kyselina ethylendiamintetraoctová), 1 ml 10% roztoku tenzidu (detergentu) Triton X-100 a 5 ml 0,1% (hm.) roztoku křenové peroxidasy a vše bylo doplněno na celkový objem 50 ml 0,05M octanovým pufrem o pH 5,0. 2,00 ml tohoto činidla byly smíseny se 2,00 ml roztoku peroxidu vodíku o neznámé koncentraci a po 15 minutách byla změřena absorbance při 460 nm. Vypočítejte koncentraci peroxidu vodíku ve vzorku, v němž byla v kyvetě o optické dráze 1 cm naměřena absorbance 0,893. Výsledek zaokrouhlete na 3 platné číslice.

Výpočet:

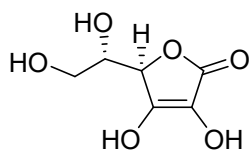
Koncentrace: (nezapomeňte na jednotky)

body:

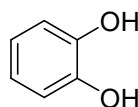
**Úloha 2 Antioxidanty****25 bodů**

Vzhledem ke značné škodlivosti reaktivních forem kyslíku příroda vyvinula řadu organických látek (antioxidantů), které neenzymově zhasí kyslíkaté radikály tím, že jedoelektronově redukuje radikál na příslušnou strukturu bez nepárového elektronu, a samy se stávají radikálem. Tento radikál je však natolik málo reaktivní díky sterickému bránění radikálových center a delokalizaci, že již není schopen poškodit důležité buněčné struktury. Celý proces je často (ale ne nutně) spojen s protonací a deprotonací reakčních složek. Vysoká koncentrace přírodních antioxidantů je například v čaji, šípcech atd.

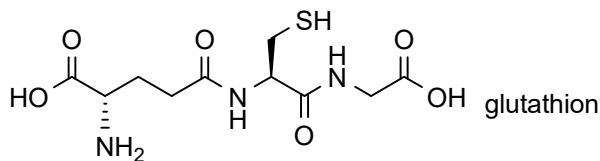
- 1) Nakreslete radikály, které vzniknou z následujících přírodních antioxidantů (stačí nakreslit tu část struktury, kde se radikály liší od uvedených vzorců).**



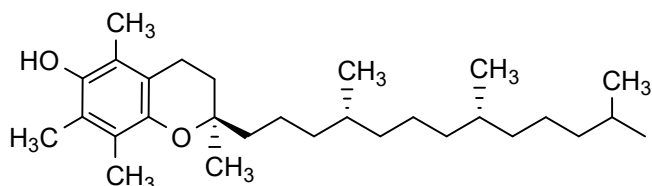
kys. L-askorbová
(vitamín C)



pyrokatechin



glutathion



α -tokoferol
(vitamín E)

Schéma kyselina L-askorbová:

Schéma pyrokatechin:

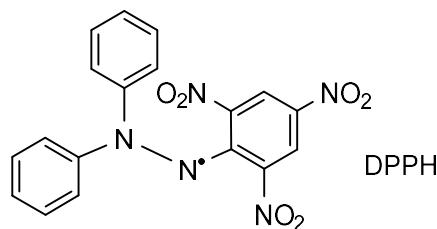
Schéma glutathion:

Schéma α -tokoferol:

body:



Na spektrofotometrické stanovení schopnosti látek zhášet radikály se často užívá stabilní radikál difenylpicrylhydrazyl (DPPH), který je jako radikál fialový a v redukovaném stavu žlutohnědý.



- 2) Nakreslete alespoň tři další rezonanční struktury difenylpicrylhydrazylového radikálu. Vysvětlete, proč je difenylpicrylhydrazyl tak stabilní, že se dá izolovat (a je komerčně dostupný) v krystalické formě volného radikálu.

Odpověď:

body:

Ochranná role antioxidantu spočívá v tom, že reaguje s reaktivními formami kyslíku rychleji než chráněná živá struktura. Pokud však při reakci antioxidantu např. s kyslíkem vzniká ještě reaktivnější forma kyslíku jako vedlejší produkt nebo se redukcí antioxidantem recykluje fentonovský katalyzátor, může se stát, že antioxidant oxidační stres zhorší – tzv. *prooxidační efekt*. Můžete si ho představit třeba tak, že zabránění přístupu vzduchu uhasí oheň, ale hasit dřevo tak že na něj nastříkáme mnohem snadněji hořlavý benzin s úmyslem dřevu sebrat kyslík hořením benzínu není moc praktické. Ve skutečnosti je hlavní fyziologická role kyseliny askorbové – vitamínu C – v organismu založena na prooxidačním efektu.

- 3) Slovně vysvětlete, k jaké reakci je vitamín C v organismu nezbytný a jak funguje. Náповěда: souvisí to s příznakem kurdějí, kdy v důsledku nedostatku vitamínu C např. vypadávají zuby a zhoršuje se mechanická pevnost řady tkání, potažmo se strukturou kolagenu.

Odpověď:

body: