

Masarykova univerzita

Přírodovědecká fakulta



**ViBuCh**

Vzdělávací ikurz pro budoucí chemiky

# **Vzdělávací ikurz pro budoucí chemiky**

**Zadání 2. série**

**11. ročník (2021/2022)**

Korespondenční seminář ViBuCh probíhá pod záštitou [Ústavu chemie](#) a [Centra RECETOX](#) Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity.

Recenze úloh:

Matúš Chvojka (S4), Simona Krupčíková (C2), Jan Novotný (B2), Zbyněk Prokop (A2), Jan Sokolov (S3)

© 2021 Zuzana Bílková, Marie Grunová, Jana Lapešová, Petra Pikulová, Daniel Pluskal a Hana Slámová.

© 2021 Masarykova univerzita

## Úvodník

Milé ViBuŠnice, milí ViBuŠníci,

rok se s rokem sešel a Vy nám to teď pěkně spočítáte. Nejdřív se s pandou Fandou připravíte na Vánoce s bambusem a trochou octu. Potom se přidá Sovička a Žeryk a nějaké to bum. A protože svátky na konci roku znamenají obvykle pěkných pár kilo navíc, bude se Vám zajisté hodit vědět, jak rychle mohou pracovat enzymy ve Váš prospěch. Pokud ale budete chtít prohnat nejen svá kila, ale i mozkové buňky, nachystali jsme Vám řádnou nadílku molekulových orbitalů. Nakonec Vás navštíví nejen Ježíšek, ale i Analytík. Že pořád nevíte, co to ten Analytík je? No, to je tajná myška věc, co se nám bude hodit později.

Tajných tajných myška věcí pro Vás chystáme na následující rok mnoho, takže nezapomeňte sledovat náš facebook a Instagram, ať o všech víte, mohly by se Vám hodit později.

Krásné Vánoce, šťastný nový rok a spoustu cukroví a zapeklitých chemických úloh za org tým přejí

Maru, Peťa a Hanka.

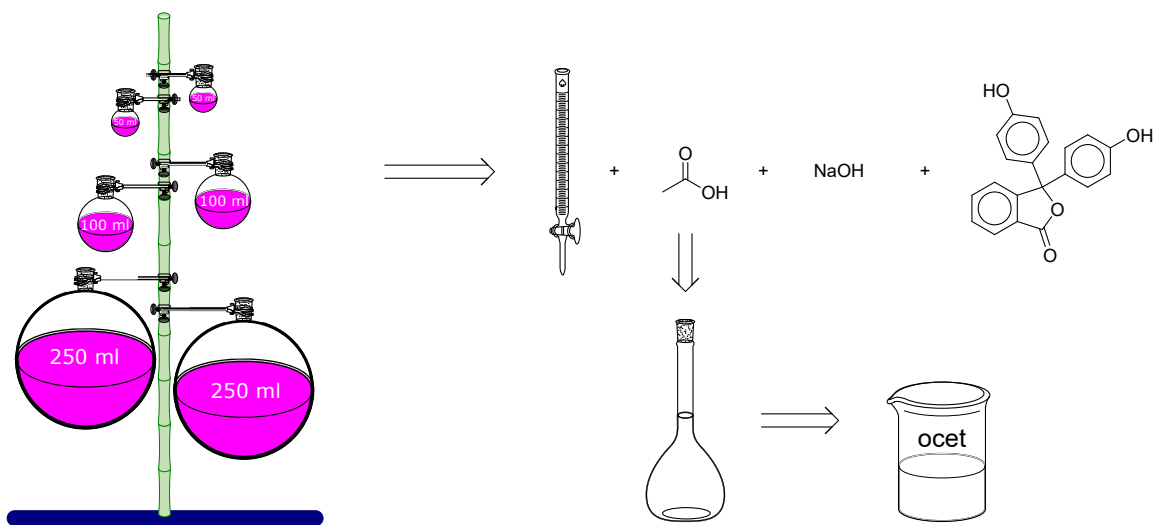
### S3 – Fanda a Vánoce (třetí úvodní úloha)

Autorka: Jana Lapešová (e-mail: 474482@mail.muni.cz)

5 bodů

„Blíží se Vánoce!“ zvolal panda Fanda hned po probuzení 30. listopadu. „Zítra začíná prosinec a já ještě nemám adventní kalendář,“ přemýšlel u snídaně. „Denk, Panda, denk! Was magst du außer dem Bambus und Schlaf?“ ozývalo se z Fandovy klece v schönbrunnské zoo.<sup>1</sup> „Chemie!“ zvolal nakonec, „no jasně, udělám si chemický adventní kalendář!“ A místo chroupání bambusu s ním začal kreslit na zem.

Fanda se rozhodl spojit adventní kalendář s vánoční výzdobou. Vždycky se mu líbila taková ta růžová barva, kterou má fenolftalein, když se při acidobazické titraci dosáhne bodu ekvivalence. Byla by to naprosto ideální barva pro baňky na jeho vánoční bambus. Jenže bez té titrace by to nebylo ono. V pandě kuchyni našel ocet, který používá pro přípravu bambusovo-zeleninového salátu, a hydroxid sodný na čištění odpadů. Tím si zajistil jak kyselinu (octovou), tak zásadu (hydroxid sodný) pro svou acidobazickou titraci. Fenolftaleinu potřebuje jen trochu, takže toho má v laboratoři dostatek. Jednotlivé přídavky titrace budou představovat jednotlivé dny ve Fandově adventním kalendáři. Jakmile roztok zrudne, budou Vánoce a roztok může použít na naplnění baňek na vánočním bambusu. „Geniální!“ pomyslel si. A jelikož je Fanda organický chemik, začal retrosyntetickou analýzou (obrázek 1).



**Obr. 1:** Retrosyntetická analýza Fandova vánočního bambusu se dvěma 50ml, dvěma 100ml a dvěma 250ml baňkami s růžovým roztokem.

**Úkol 1:** Fanda zjistil, že 5,000 ml octa obsahuje 250,3 mg kyseliny octové. Určete, který ocet použil, když jablečný ocet obsahuje obvykle přibližně 5 objemových procent kyseliny octové, vinný 6 % obj. a kvasný 8 % obj.? Molární hmotnost kyseliny octové je 60,05 g mol<sup>-1</sup>. Hustota kyseliny octové je 1,049 g cm<sup>-3</sup>. Uveďte koncentraci kyseliny octové ve Fandově vzorku octa v objemových procentech i v jednotkách molární koncentrace.

**Úkol 2:** Fanda standardizoval roztok hydroxidu sodného na kyselinu šťavelovou, ale nepopsal si kádinky s roztoky. Naštěstí má velkou sbírku chloridů, a tak může srážecí reakcí malého

<sup>1</sup> „Mysli, pando, mysli! Co máš rád kromě bambusu a spánku?“

vzorku z jednotlivých kádinek určit, ve které je roztok kyseliny šťávelové a ve které je naředěný ocet. Který běžně dostupný chlorid byste mu doporučili? Jakým způsobem byste rozlišili, zda je v kádince hydroxid sodný, demineralizovaná voda, nebo některá z kyselin?

**Úkol 3:** Fanda se rozhodl připravit si 1000 ml *růžového roztoku*. Tento roztok vznikne tak, že vezme určité množství vzorku octa o koncentraci z úkolu 1, naředí ho a v průběhu 24 dní bude každý den přikapávat přídavek 20,00 ml roztoku hydroxidu o koncentraci  $0,1036 \text{ mol dm}^{-3}$ . Jaký objem a jakou koncentraci (v  $\text{mol dm}^{-3}$ ) by měla mít kyselina octová ve vzorku zředěného octa v titrační baňce, aby na Vánoce, tedy po 24 přidavcích roztoku hydroxidu, dosáhl bodu ekvivalence a současně měl v baňce dostatek, tj. 1000 ml, *růžového roztoku*? Díky tomu, že si Fanda připraví větší množství roztoku, než kolik potom bude potřebovat na plnění baněk na stromečku, může zanedbat objemovou kontrakci a předpokládat, že smícháním  $A$  ml roztoku zředěné kyseliny octové a  $B$  ml roztoku hydroxidu vznikne přesně  $(A + B)$  ml *růžového roztoku*.

**Úkol 4:** Zředěný roztok kyseliny octové Fanda připravil naředěním octa demineralizovanou vodou v odměrné baňce. V pandí laboratoři má k dispozici 100ml, 250ml a 1000ml odměrnou baňku, jakou nejmenší z nich může použít, aby všechen potřebný roztok připravil najednou? Kolik octa (o koncentraci z úkolu 1) Fanda potřebuje, aby připravil tento zředěný roztok (o koncentraci z úkolu 3)?

**Úkol 5:** Pro jakou oblast pH je fenolftalein vhodným indikátorem? Hodí se pro stanovení kyseliny octové? Jednoduše Fandovi vysvětlete, proč tomu tak je.

**S4 – Tři nitroskupiny pro Žeryka (čtvrtá úvodní úloha)**

Autor: Marie Grunová (e-mail: 500075@mail.muni.cz)

8 bodů

Byl pozdní večer 27. prosince. Sovička, Žeryk a Fanda, který přijel za zvířátky na návštěvu, leželi, nacpaní cukrovím, na pohovce a spokojeně poklimbávali.

„Hmm, Sovičko, já jsem pořád v takové vánoční náladě... Nemůžu uvěřit, že svátky už končí...“ ozval se nešťastně Žeryk.

„Bist du komisch? Vždyť bude ještě Silvestr...“, ozval se lenivě Panda Fanda, přetočil se na pohovce a upřel svůj pohled na Sovičku, aby mu pomohla Žeryka nějak uchlácholit.

„Ano, přesně tak... Eh... Silvestr... To jsou ohňostroje... Ty jsou přece různě barevné a tak... Emm... Za to můžou většinou různé anorganické soli... A to bychom se mohli podívat na nějakou analytiku!“, ukončila Sovička svůj tok myšlenek veselým zajásáním.

„Analytika? Ale to budou zase výpočty, ne? Těch já teď mám ale pěkně po krk, já bych teda raději nějakou organiku...“

„Ty jsi dneska nějaký náročný... No, dobře, co bouchá, je to barevné a taky organika... Už to mám! Nitrosloučeniny!“

Jak Sovička řekla, tak také udělala. Vytáhla zpod pohovky notebook, tabuli a hromadu fixů a začala se svým výkladem.

„Nitrosloučeniny jsou velice zajímavá skupina látek. Vzhledem k tomu, že nitroskupina obsahuje dusík a dva kyslíky, slouží molekule jako vlastní zdroj kyslíku a k tomu při jejím hoření vzniká spousta plynného  $N_2$  a  $CO_2$ , takže molekula hoří rychle a vzniká spousta plynů v malém prostoru. A tomu se, milá zvířátka, říká výbuch.

Ale jak takovou nitrosloučeninu vlastně připravit? No, takovým evergreenem organické chemie je nitrace.“

**Úkol 1:** Obvyklou nitrační směs tvoří kyselina dusičná s ještě jednou další kyselinou.

- Uveďte, o jakou kyselinu jde?
- Co vzniká reakcí  $HNO_3$  a této kyseliny (co je aktivní částicí, která může reagovat například s nějakým aromátem elektrofilní aromatickou substitucí)? Nakreslete pomocí šipek znázorňujících pohyb elektronů také mechanismus vzniku této částice.
- Podmínkou pro druhou kyselinu je, aby byla schopná vnutit kyselině dusičné svůj proton, což lze poznat třeba na základě  $pK_a$ . Musí být  $pK_a$  druhé kyseliny nižší nebo vyšší než  $HNO_3$ ? Ovšem to není jediná podmínka. Proč by nebylo možné použít k nitraci jako druhou kyselinu například kyselinu chlorovodíkovou (zamyslete se nad účinky  $HNO_3$  a rozdíly mezi  $HCl$  a běžně užívanou druhou kyselinou)?

„Samozřejmě se krom běžné nitrační směsi dají najít i mnohé jiné směsi, ale když chemik mluví o nitrační směsi, myslí právě tuhle.“, pokračovala Sovička.

„Ovšem, bez čeho se neobjede asi žádná nitrační směs je kyselina dusičná nebo dusičnany. Dneska už není vůbec těžké si nějakou takovou kyselinu dusičnou připravit, ale byla doba, kdy se vyráběla vytěšňováním z chilského ledku.“

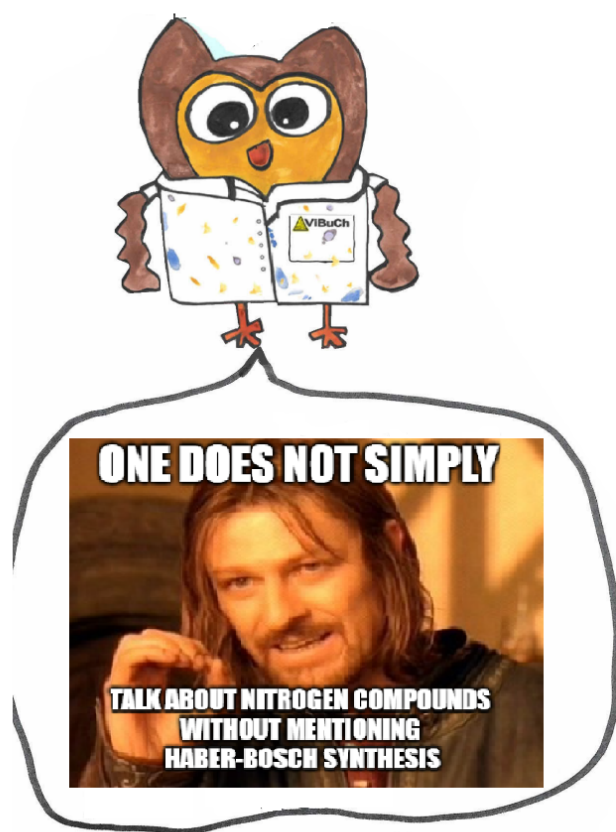
**Úkol 2:** Jak to tak ale bývá, přišla první světová válka a s ní i potřeba vyrábět spoustu výbušnin. Pro jednu z válčících stran bylo velmi obtížné si ledek z Chile obstarat, a tak byl v Německu zaveden nový výrobní proces. Ten de facto provádí přímou fixaci atmosférického  $N_2$  a vznikající plyn je následně možné Ostwaldovým procesem převést na kyselinu dusičnou. Pokud Německo v létě 1916 potřebovalo 130 000 tun kyseliny dusičné měsíčně na vojenské účely, jak velký mrak atmosférického dusíku (chovajícího se jako ideální plyn) za normální německé letní teploty 22 °C by musel být zpracován?

„Sovičko, já jsem si ale myslel, že jsem říkal žádné výpočty“, ozval se podrážděně Žeryk.

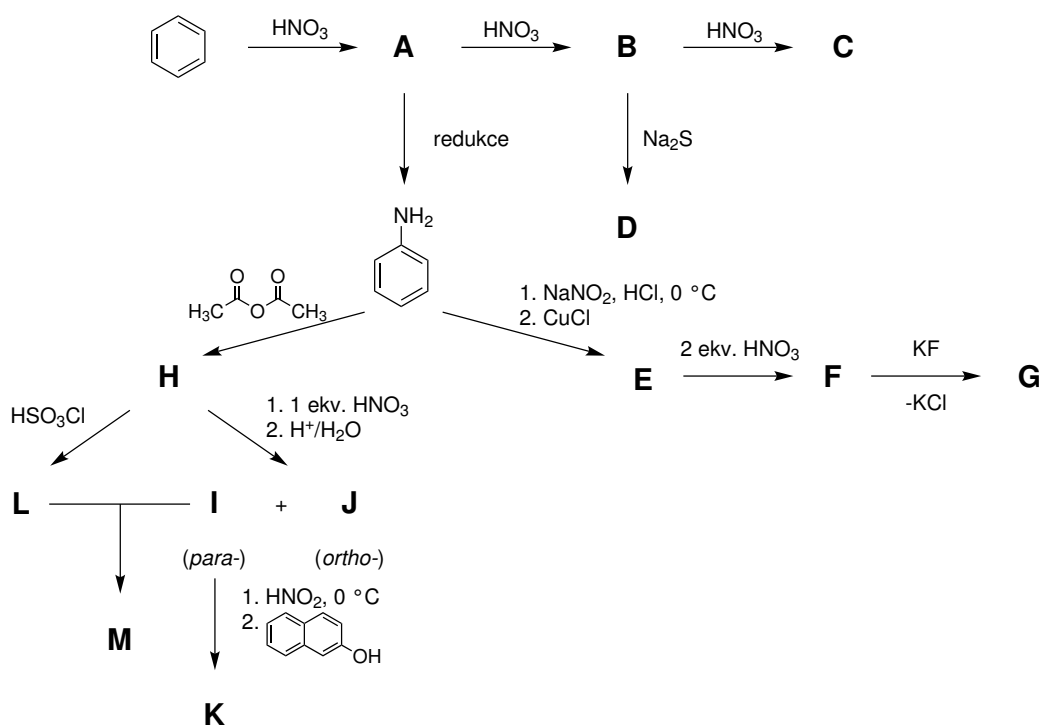
„Ale tak jeden maličký snad zvládneš, ne? Každopádně, uvedená syntéza je dokonalým příkladem toho, že věda sama o sobě není ani zlá, ale ani dobrá a že záleží na lidech k čemu dané objevy využijí. Stejně tak ani příběhy vědců nejsou černobílé.“

**Úkol 3:** Haberova-Boschova syntéza je pojmenována po dvou pánech. Právě jeden z nich, Fritz Haber, byl typem člověka, který byl na správném místě ve správnou dobu na špatné straně, a to jen kvůli tomu, že dějiny píší vítězové. Jaká látka se uvedenou syntézou vyrábí? Uveďte alespoň dva další počiny nebo objevy tohoto vědce.

„Tohle zní nějak moc jako historie a nějak málo jako organika. . .“



„Úplně ti rozumím, tak bychom se mohli tedy na nějakou tu organiku podívat. A co by to bylo za organiku bez pořádného reakčního pavouka pro aromáty“, prohlásila zvesela sovička a začala kreslit benzen.



**Úkol 4:** Nakreslete strukturu produktů **A–M**.

**Úkol 5:** Uveďte alespoň tři činidla, která provedou redukci **A** na anilin (aminobenzen).

**Úkol 6:** Při reakci anilinu na **E** nejprve vzniká intermediát, který dále reaguje s CuCl za vzniku **E**. Nakreslete strukturu tohoto intermediátu.

**Úkol 7:** Látky **M** a **K** zastupují dvě významné skupiny organických látek, obsahujících dusík. O jaké skupiny jde a k čemu se obecně každá z nich využívá? Jak se látky **M** a **K** jmenují triviálně?

**Úkol 8:** Látku **G** je možné použít k sekvenování jedné skupiny biomolekul.

- O které biomolekuly jde?
- Látka **G** slouží k označení jedné části takové biomolekuly, které? Popište rovnici.
- S využitím látky **G** v sekvenování uvedených biomolekul souvisí jedna Nobelova cena. Kdo ji získal a v kterém roce?



**A2 – Malé, ale šikovné! – Enzymová kinetika 101**

Autor: Daniel Pluskal (e-mail: pluskal.daniel@gmail.com)

13 bodů

*Metabolismus je složitá mašinerie, kde do sebe všechno musí zapadat jako ozubená kolečka. Jedna reakce pohání druhou a ta zase ovlivňuje třetí a čtvrtou. Takový stroj proto musí být řádně seřízený: jedna část stroje se zrychlí, a tak vyčerpá své zásoby, anebo zpomalí a ve stroji už to začíná drít – co pak? Z tohoto důvodu se nám hodí vědět nejen, co který enzym dělá, ale také jak rychle to dělá a co může mít na jeho činnost vliv.*

Popsanými problémy se zabývá tzv. **enzymová kinetika** a to nejen proto, aby změřila, jak rychle se který enzym zvládne prožrat zásobami svého substrátu<sup>2</sup>, ale také proto, abychom zjistili, jakou roli má činnost kterého enzymu v organismu, jak je jejich práce regulována a také jakým způsobem enzymaticky katalyzované reakce probíhají. Reakční mechanismus „substrát → mikroskopická magie → produkt“ je totiž dle některých zlých jazyků „až příliš zjednodušující“. Mluvte pak o sférických kravách<sup>3</sup>.

**Úkol 1:** Enzymy jsou biologické katalyzátory – svým substrátům poskytují oproti nekatalyzované reakci alternativní, energeticky výhodnější způsob, jakým reakci podstoupit. Uvažujme nyní jednoduchou reakci  $A \rightarrow B$ . Pokud reakce proběhne za nepřítomnosti katalyzátoru, v reakční směsi se ustálí rovnováha  $A:B = 1:10$ . Jak se tento poměr změní, pokud stejná reakce proběhne za přítomnosti správného katalyzátoru?

Nejzákladnější veličinou, která popisuje enzymovou katalýzu, je **enzymová aktivita**. Tato veličina vyjadřuje množství enzymu, které za daný čas katalyzuje přeměnu určitého množství příslušného substrátu. Přestože nám neříká téměř nic o charakteru pozorované reakce, je velmi užitečná třeba při rychlých, rutinních metodách, při kterých nám jde o srovnání „katalýzy-schopnosti“ několika různých vzorků enzymů anebo stanovení, kolik enzymu ve vzorku vlastně máme.

**Úkol 2:** Dostali jste za úkol stanovit aktivitu vzorku alkoholdehydrogenasy (ADH). Protože víte, že ADH katalyzuje reakci:



rozhodli jste se její aktivitu stanovit na základě Warburgova optického testu. Celý vzorek ADH o objemu 0,530 ml jste umístili do kyvety s optickou dráhou 1,00 cm, ke vzorku jste přidali 1,00 ml roztoku ethanolu a  $\text{NAD}^+$ , reakční směs jste promíchali a vložili do fotometru. Následně jste změřili absorbanci reakční směsi při 340 nm a současně spustili stopky. Přesně 60,0 sekund po spuštění stopek jste absorbanci vzorku změřili znovu. Vypočtete enzymovou aktivitu vzorku ADH v jednotkách nkat, pokud jste při prvním měření absorbance zjistili hodnotu 0,051 a při druhém 0,362. Předpokládejte, že probíhající reakce je nultého řádu.  $\varepsilon(\text{NADH}, 340 \text{ nm}) = 6220 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ,  $\varepsilon(\text{NAD}^+, 340 \text{ nm}) = 0 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ .

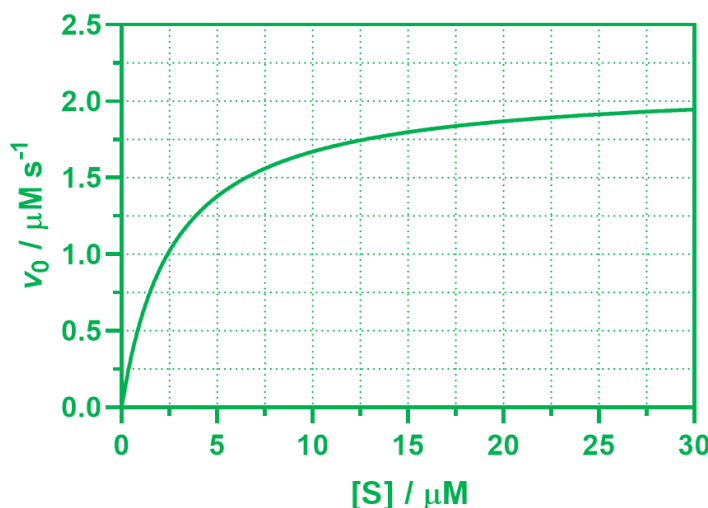
Průkopníky v oboru enzymové kinetiky byli Leonor Michaelis a Maud Leonora Mentenová, kteří položili základ tomuto oboru na modelu hydrolýzy sacharosy enzymem invertasou. Matematickým vyjádřením jejich stěžejního zjištění je **rovnice Michaelise a Mentenové**, která

<sup>2</sup>Pro připomenutí, v enzymologii se pojmem „substrát“ označuje výchozí látka enzymové reakce. Další informace z enzymové kinetiky včetně vzorečků, které budete potřebovat pro výpočty v následujících úlohách, naleznete ve studijním materiálu k této úloze (odkaz [zde](#)).

<sup>3</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Spherical\\_cow](https://en.wikipedia.org/wiki/Spherical_cow)

dává do vztahu počáteční rychlost enzymové reakce s koncentrací enzymu a substrátu v reakční směsi na základě limitní rychlosti enzymové reakce a tzv. Michaelisovy konstanty – prostě takovými těmi normálními věcmi, o kterých se mezi sebou enzymologové baví při obědě, káféčku a každé další vhodné i nevhodné příležitosti<sup>4</sup>. No jo, ale co to vlastně všechno znamená? Limitní rychlost reakce vyjadřuje maximální možnou rychlost, jakou enzym může pracovat, anebo taky rychlost, s jakou řešíte tuto úlohu, pokud je termín odevzdání sady dnes o půlnoci. A Michaelisova konstanta je zase ukazatelem afinity enzymu k substrátu, tedy toho, jak stabilně se substrát na enzym váže; čím méně substrátu je potřeba k vyvolání určité odpovědi enzymu, tím nižší je jeho Michaelisova konstanta a vyšší afinita vůči substrátu.

**Úkol 3:** V grafu níže je vynesena závislost počáteční rychlosti enzymové reakce enzymu vymyšlenasy na koncentraci jejího substrátu 2-methylvymyšlenolu při konstantní koncentraci vymyšlenasy  $0,20 \mu\text{M}$ . Z grafu odečtete hodnotu limitní rychlosti enzymové reakce ( $V_{\text{lim}}$ ) a Michaelisovy konstanty ( $K_m$ ) vymyšlenasy pro 2-methylvymyšlenol a vypočtete hodnotu katalytické konstanty ( $k_{\text{cat}}$ ) této reakce. Hodnoty veličin samozřejmě uveďte včetně správných jednotek.



**Úkol 4:** Některé enzymy, např. katalasu, superoxiddismutasu nebo acetylcholinesterasu označujeme jako tzv. *evolučně dokonalé enzymy*. Co rozumíme pod pojmem evolučně dokonalý enzym, resp. jaké jsou podmínky pro to, aby si enzym zasloužil klasifikaci jako evolučně dokonalý?

**Úkol 5:** Enzymy glukokinasa a hexokinasa katalyzují oba stejnou reakci:



Glukokinasa pro glukosu pracuje s  $V_{\text{lim}} = 1,5 \mu\text{M min}^{-1}$  a  $K_m = 10 \text{ mM}$ , hexokinasa zase s parametry  $V_{\text{lim}} = 0,10 \mu\text{M s}^{-1}$  a  $K_m = 0,1 \text{ mM}$ . Za předpokladu, že ATP je v nadbytku, vypočtete hodnotu počáteční rychlosti enzymové reakce pro oba enzymy při koncentraci glukosy  $1,0 \text{ mM}$  (nízká hladina glukosy),  $5,0 \text{ mM}$  (běžná hladina glukosy) a  $30 \text{ mM}$  (hladina glukosy při diabetu). Na základě zjištěných hodnot počáteční rychlosti reakce pak srovnajte odpověď

<sup>4</sup> „Dobrý den, pane enzymolog, tak co si dnes dáte?“ „Káféčko a buchtíčku, ale pracujte prosím svojí limitní rychlostí, nestíhám na jednání, vůči kterému mám vysokou Michaelisovu konstantu.“ „A ven!“

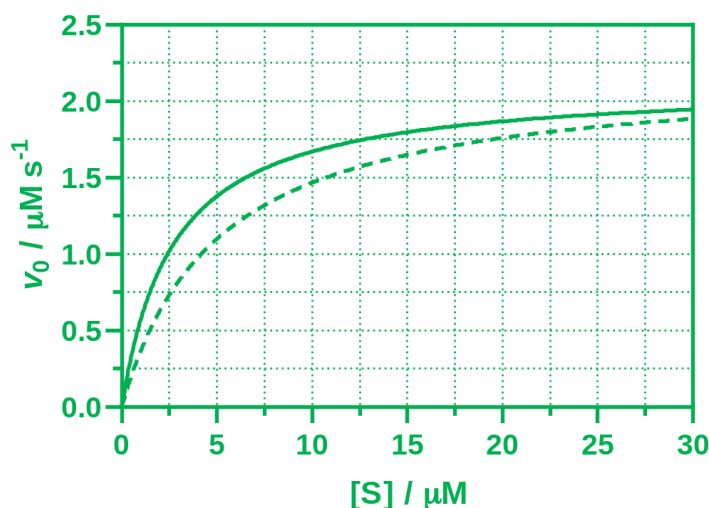
glukokinasy a hexokinasy na různou koncentraci glukosy. Pozn.: pro oba enzymy dostanete 3 hodnoty počáteční rychlosti, dohromady tedy 6 hodnot; počáteční rychlost reakce vypočtete pro jednoduchost v jednotkách  $\mu\text{M min}^{-1}$ .

Enzymová aktivita je charakteristická svou vysokou regulovatelností. Vyjma koncentrace enzymu a substrátu je závislá na celé řadě dalších parametrů, z nichž se nejčastěji zabýváme **pH** a **teplotou**. Většina enzymů preferuje fyziologické podmínky, tedy teploty kolem  $37\text{ }^{\circ}\text{C}$  a pH okolo 7. Z každého pravidla ovšem existují výjimky jako například pepsin, který musí pracovat v kyselé žaludeční šťávě (pH 1,5–2,0), anebo *Taq* polymerasa z extrémofilní bakterie *Thermus aquaticus*, která si v klídečku polymerizuje při  $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ , jakoby se nechumelilo (ne-téměř-vařilo). Změny pH zapříčiňují změnu iontových forem aminokyselin proteinu, což může ovlivnit stabilitu enzymu, vazbu substrátu, konformaci aktivního místa, samotný katalytický mechanismus a mnohé další. A jak je to s teplotou, to je předmětem následujícího úkolu.

**Úkol 6:** Změnu rychlosti chemické reakce s teplotou obecně popisuje Arrheniova rovnice, dle které se reakční rychlost s narůstající teplotou zvyšuje. Pro enzymovou katalýzu však tento vztah úplně neplatí: při určité teplotě se jejich aktivita přestává zvyšovat a se stoupající teplotou dokonce klesá. Co je příčinou této anomálie?

Myslím si, že nestřelím vedle, když budu hádat, že drtivá většina z vás už někdy musela polknout tabletku s paracetamolem, ibuprofenem, naproxenem nebo kyselinou acetylsalicylovou, spíše známými pod svými obchodními názvy Paralen, Ibalgin, Nalgesin a Aspirin. Víte, co mají všechny tyto látky společného? Všechno jsou to **enzymové inhibitory**, tedy látky, které zpomalují enzymovou aktivitu. V případě všech zmíněných pilulek se jedná o inhibitory enzymů cyklooxygenas, které jsou zodpovědné za vznik tzv. prostaglandinů, signálních molekul, které nervové soustavě říkají, že ji někde něco bolí anebo je zanícené. Společně s odpovědí na otázku „Jak ta pilule může vědět, kde mě zrovna co bolí?“ otevíráme zadní dvířka tématu využití enzymových inhibitorů ve výzkumu, kde nám stanovení mechanismu inhibice enzymu daným inhibitorem může o enzymové reakci leccos napovědět.

**Úkol 7:** V grafu níže je vynesena nám již známá závislost počáteční rychlosti enzymu vymyšlenasy na koncentraci jejího substrátu 2-methylvymyšlenolu při konstantní koncentraci vymyšlenasy (spojitá čára) a tentokrát i stejná závislost za přítomnosti inhibitoru vymyšlenasy (přerušovaná čára). Určete, jakým mechanismem inhibice vymyšlenasy probíhá (kompetitivní, akompetitivní, nekompetitivní nebo směsná inhibice). Co nám tento mechanismus inhibice napovídá o struktuře inhibitoru?



**Úkol 8:** Inhibice cyklooxygenas zmiňovanou kyselinou acetylsalicylovou probíhá zvláštním mechanismem tzv. *sebevražedné inhibice*. Na jakém principu obecně sebevražedné inhibitory fungují? Jedná se o reverzibilní nebo irreverzibilní typ inhibice?

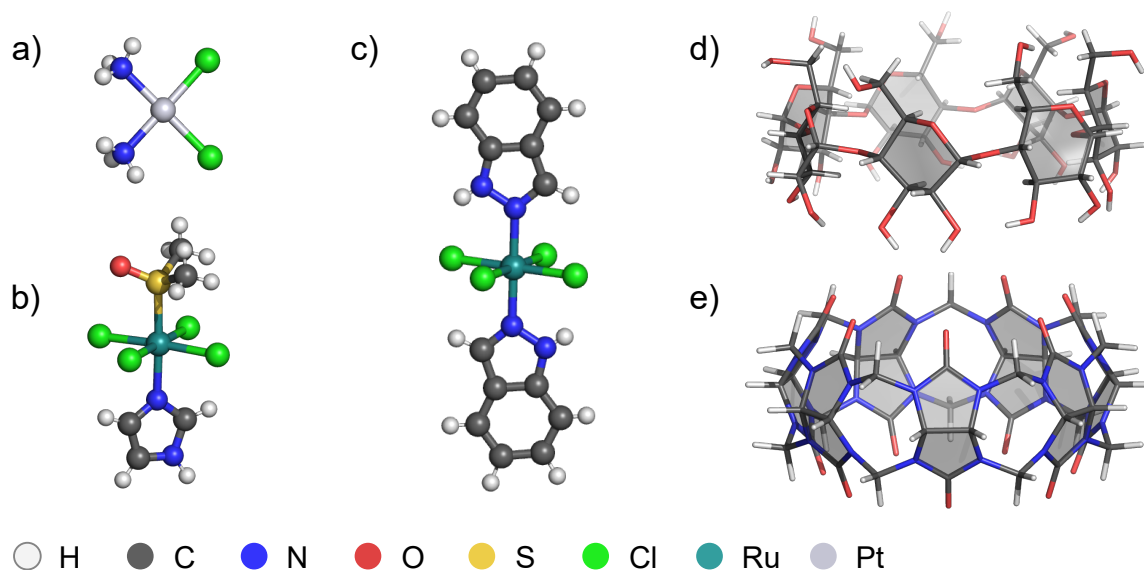
Studium enzymové kinetiky nám může o enzymech leccos povědět, od toho, za jakých podmínek studovaný enzym nejlépe pracuje, přes to, jak můžeme činnost jednotlivých enzymů ovlivňovat, až po svatý grál enzymologie: detailní pochopení reakčního mechanismu enzymové reakce. Byť se bez takto hlubokého poznání funkce enzymů můžeme do jisté míry obejít, vědět jenom to, že tahle látka je substrát a támhleta druhá zase produkt, to prostě není úplně vončo. Čím více toho o funkci enzymů víme, tím více dveří se nám otevírá nejen v základním výzkumu, ale i pro aplikace v medicíně, farmacii, potravinářství, biotechnologii a také speciálním odvětví enzymologie, **proteinovém inženýrství**, které se buďto prostřednictvím cíleného „tunění“ existujících proteinů anebo dokonce pomocí návrhu proteinů zcela nových zabývá vývojem „superproteinů“ ušitých na míru pro každý představitelný účel.

## B2 – Elektrony s kamarády, elektrony bez kamarádů

Autorka: Petra Pikulová (e-mail: pikulova@mail.muni.cz)

12 bodů

V minulé sérii jsme se dozvěděli, že elektrony, atomy či molekuly v kvantové chemii popisuje vlnová funkce, veličina, která sice sama o sobě není fyzikálně pozorovatelná, ale z ní lze kdejakou pozorovatelnou veličinu vypočítat. Pak jsme se chvíli zabývali vlnovými funkcemi atomu vodíku. Možná teď krčíte rameny a říkáte si: „Super, co tam máte dál?“ Jedno jádro, jeden elektron – nuda! Co když nás zajímá něco více vzrušujícího, například některá z molekul na obrázku 1?



**Obr. 1:** Zaujímavé molekuly. Molekuly 1b a 1c jsou jednou záporně nabitě, v obrázku chybí protiion.

**Úkol 1:** Pojmenujte všechny molekuly na obrázku 1. Stačí triviální název, ale uveďte, kde jste informaci našli. Co mají společného molekuly 1a-1c ve smyslu využití?

Hned na úvod budete bohužel zklamáni. Tyto molekuly jsou příliš složité na to, abychom byli schopni nalézt jejich exaktní vlnovou funkci. Taková vlnová funkce by v sobě musela obsahovat informace o pohybech všech jader a elektronů, které se v každém okamžiku všechny vzájemně ovlivňují. Z důvodu obecné matematické neřešitelnosti systému většího, než jsou dvě (!) pohybující se interagující částice, je taková spousta informací zcela neúnosná.<sup>5</sup>

Naštěstí pro kvantové chemiky lze hrát velké divadlo i s vlnovou funkcí, která je pouze přibližná.

### Atomy s více elektrony

Může se stát, že nás zajímá atom s více než jedním elektronem. Celková elektronová vlnová funkce je složitou funkcí souřadnic všech těchto elektronů a my netušíme, jaký by tato funkce mnoha proměnných měla mít tvar.

<sup>5</sup>Na Wikipedii se lze dočíst o tzv. problému tří těles z klasické mechaniky ([https://cs.wikipedia.org/wiki/Probl%C3%A9m\\_t%C5%99%C3%AD\\_t%C4%9Bles](https://cs.wikipedia.org/wiki/Probl%C3%A9m_t%C5%99%C3%AD_t%C4%9Bles)). Tato úloha spočívá v předpovězení budoucího vývoje soustavy tří nebeských těles, které na sebe působí gravitační silou, na základě známých počátečních podmínek. Obecné analytické řešení v uzavřeném tvaru není známo. Analogický problém tří a více „těles“ (částic, chcete-li) existuje i v kvantové mechanice.

Naštěstí si můžeme situaci zjednodušit, když budeme jednotlivé elektrony považovat za do jisté míry nezávislé. Natolik nezávislé, abychom mohli každý jednotlivý elektron popsat jeho vlastní vlnovou funkcí, jejíž podoba je dána přítomností jádra a ostatních elektronů. Těmto jedoelektronovým vlnovým funkcím se říká atomové orbitály a mají podobný tvar jako orbitály atomu vodíku, přičemž angulární část je přesně stejná, ale radiální část se liší. To proto, že elektron, který není v atomu sám, nepociťuje plný náboj jádra, ale náboj jádra stíněný ostatními elektrony.

To ale není celý příběh. Ukazuje se, že elektron má ještě jeden stupeň volnosti, který jsme dosud nezmínili, a tím je spin.

Spin je typem momentu hybnosti a v lecčem se tedy podobá orbitálnímu momentu hybnosti, který byl zmíněn v minulé sérii. V klasické fyzice je moment hybnosti veličina, která popisuje rotační pohyb. Na chvíli si velmi naivně představme atom jako sluneční soustavu, kde jádro hraje podobnou úlohu jako Slunce a elektron úlohu planety Země. Orbitální moment hybnosti popisuje pohyb elektronu na „orbitě“ kolem jádra. Je definován jako vektorový součin  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ , výsledný vektor  $\vec{L}$  je rovnoběžný s osou rotace a směr je spojen se směrem rotace pravidlem pravé ruky.<sup>6</sup> Velikost vektoru je v případě kruhové trajektorie  $rmv$ , moment hybnosti je větší, pokud je těleso hmotnější, pohybuje se větší rychlostí, nebo ve větší vzdálenosti od osy rotace. V kvantové mechanice samozřejmě nemáme trajektorie, elektron v atomu popisujeme pomocí vlnové funkce (atomového orbitálu), ale základní představa je platná. Atomový orbital zahrnuje mimo jiné i informaci o orbitálním momentu hybnosti elektronu, je zakódovaná v kvantových číslech  $l$  a  $m_l$ .

U spinu je představa nějakého rotačního pohybu, z něhož by vycházel, zavádějící.<sup>7</sup> Lepší je vzít na vědomí fakt, že některým částicím je moment hybnosti prostě vlastní, asi jako je jim vlastní hmotnost nebo náboj.

Podobně jako u orbitálního momentu hybnosti je velikost spinového momentu hybnosti

$$|\vec{S}| = \hbar \sqrt{s(s+1)},$$

kde  $s$  je spinové kvantové číslo, které má pro elektron hodnotu  $\frac{1}{2}$ , a  $\hbar$  je redukovaná Planckova konstanta.

V kvantové mechanice je kvantována nejen velikost vektoru momentu hybnosti ( $\vec{L}$  nebo  $\vec{S}$ ), ale i jeho orientace. Důsledkem je, že v experimentech lze pozorovat jen dovozené průměty do vybrané osy, která se konvenčně značí  $z$ . Podobně jako v případě orbitálního momentu hybnosti je velikost  $z$ -ové složky spinového momentu hybnosti

$$S_z = m_s \hbar,$$

kde  $m_s$  je kvantové číslo, v případě elektronu může nabývat hodnot  $m_s = +\frac{1}{2}$ , nebo  $m_s = -\frac{1}{2}$ .

K popisu elektronu, který zahrnuje informaci jak o prostorovém rozložení, tak o spinu, se používá tzv. spinorbital, tedy součin prostorové a spinové vlnové funkce

$$\phi_{n,l,m_l,m_s} = \chi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) \cdot \sigma,$$

přičemž funkce  $\sigma$  může být buď  $\alpha$  ( $m_s = +\frac{1}{2}$ ,  $\uparrow$ , spin nahoru), nebo  $\beta$  ( $m_s = -\frac{1}{2}$ ,  $\downarrow$ , spin dolů).

Celkovou vlnovou funkci atomu lze poskládat z těchto spinorbitalů, v tuto chvíli však není příliš důležité, jak přesně. Důležité je, že stav atomu je specifikován tím, kolik elektronů obsazuje které orbitály a jaký mají spin. To nejspíš znáte jako elektronovou konfiguraci.<sup>8</sup>

<sup>6</sup>[https://cs.wikipedia.org/wiki/Pravidlo\\_prav%C3%A9\\_ruky](https://cs.wikipedia.org/wiki/Pravidlo_prav%C3%A9_ruky)

<sup>7</sup>Velmi nás to svádí k představě, že se elektron otáčí kolem vlastní osy podobně jako planeta Země. Kvantově-mechanický moment hybnosti s poločíselným kvantovým číslem však nemůže být spojen s rotací, například proto, že nemohou být splněny okrajové podmínky vyplývající z požadavku, aby vlnová funkce byla spojitá.

<sup>8</sup>Pomůžeme nyní fakt, že u některých systémů není jediná konfigurace dobrým popisem vlnové funkce.

Pro možné elektronové konfigurace existuje omezení v podobě Pauliho principu. Ten říká, že se elektrony od sebe musejí lišit alespoň kvantovým číslem  $m_s$ , do stejného orbitalu lze tedy umístit maximálně dva elektrony s opačným spinem.

**Úkol 2:** Pauliho princip neplatí pouze pro elektrony, ale pro celou skupinu částic, kterým se říká **X**. Jaké je základní rozlišovací kritérium, na jehož základě částice spadají nebo nespádají do této skupiny? Jaké slovo se schovává pod **X**?

Pro předpověď nejstabilnější elektronové konfigurace se používá výstavbový princip (orbitály se zaplňují v pořadí od nejnižší k vyšším energiím) a Hundovo pravidlo maximální spinové multiplicity (pokud se rozhodujeme, jak zaplnit orbitály se stejnou energií, preferujeme konfiguraci s nejvyšší spinovou multiplicitou).<sup>9</sup>

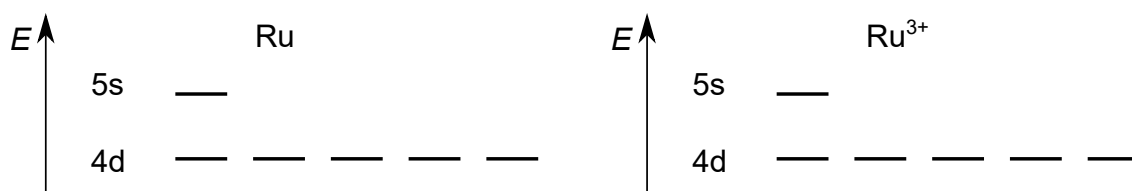
Spinová multiplicita se počítá jako

$$M = 2S + 1,$$

kde  $S$  je celkové spinové kvantové číslo. Pokud jsou v jednom orbitalu dva elektrony s opačným spinem, výsledný spin je nulový, k celkovému spinu přispívají pouze nepárové elektrony. Pokud mají všechny nepárové elektrony paralelní spiny, je  $M$  rovno počtu nespárovaných elektronů plus jedna. Pro stavy s různou multiplicitou se používají také názvy singlet ( $M = 1$ ), dublet ( $M = 2$ ), triplet ( $M = 3$ )...

**Úkol 3:** Napište elektronovou konfiguraci atomu Ru a iontu  $\text{Ru}^{3+}$ , atomu Pt a iontu  $\text{Pt}^{2+}$ . Můžete použít zápis pomocí konfigurace nejbližšího vzácného plynu. Také doplňte elektrony jako šipky do energetického diagramu na obrázku 2.

**Úkol 4:** Určete spinovou multiplicitu iontu  $\text{Ru}^{3+}$  (vyjděte z elektronové konfigurace, kterou jste určili v minulém úkolu).



Obr. 2: Schéma energetických hladin v atomu Ru a iontu  $\text{Ru}^{3+}$ .

## A co molekuly?

To všechno je pěkné, jenže jsme chemici a izolované atomy či ionty ve vakuu nám pořád moc chemické nepřipadají. Nemůžeme se konečně pustit do nějakých molekul?

Nejprve se sluší zmínit jednu podstatnou aproximaci, která se v chemii široce používá. Tato aproximace nese jména významných fyziků Borna a Oppenheimera. Pokud ji použijeme, náš problém se zjednoduší na elektrony a nemusíme explicitně řešit pohyby jader.

<sup>9</sup>Toto „pravidlo“ vychází z tzv. výměnné interakce, která způsobuje, že se elektrony se stejnými spiny méně elektrostaticky odpuzují než elektrony s opačnými spiny. Ve skutečnosti tento faktor nepůsobí striktně jen při degeneraci hladin, ale i v případě, že jsou energetické hladiny blízko sebe. Pak je třeba proti sobě vážit více faktorů - stojí více energie dát elektron do orbitalu s vyšší energií, kde ale bude mít stejný spin a výhodnou výměnnou interakci, nebo spárovat elektrony na nižší hladině?



**Úkol 5:** Vysvětlete, v čem spočívá Bornova-Oppenheimerova aproximace. Proč by se bez ní výrazně zkomplikoval pojem „struktura molekuly“?

Pro elektronovou vlnovou funkci molekul je základní myšlenka celkem podobná jako pro atomy – nějakým způsobem poskládáme celkovou vlnovou funkci z vlnových funkcí jednotlivých elektronů, v tomto případě molekulových orbitalů. Oproti atomům vyvstává problém – nevíme, jaký by tyto jedoelektronové funkce měly mít tvar. V kvantové chemii se jako řešení tohoto problému často používá přístup MO-LCAO (Molecular Orbitals – Linear Combination of Atomic Orbitals). Molekulové orbitály se hledají jako lineární kombinace atomových orbitalů centrovaných na různých atomech v molekule.

Co znamená „lineární kombinace“? Dejme tomu, že máme atomové orbitály  $\chi_1, \chi_2, \chi_3 \dots$ . Molekulový orbital  $\phi_j$  pak hledáme ve tvaru

$$\phi_j = c_{1j}\chi_1 + c_{2j}\chi_2 + c_{3j}\chi_3 + \dots$$

tedy každý atomový orbital vynásobíme koeficientem  $c_{ij}$  (reálné číslo) a pak je sečteme. Funkce  $\chi_i$  se nazývají *bázové orbitály*.

Možná to zní pořád děsivě, proto si to hned vyzkoušíme na příkladu. S lineární kombinací jste se možná setkali u jiných objektů, než jsou funkce, a to u vektorů.

**Úkol 6:** Vezměme dva vektory  $\hat{x} = (1, 0)$  a  $\hat{y} = (0, 1)$ . Nakreslete je do systému kartézských souřadnic. Jejich lineární kombinací je obecně vektor  $\vec{a}_j = c_{xj}\hat{x} + c_{yj}\hat{y}$ . Vaším úkolem je najít vektory  $\vec{a}_1$  a  $\vec{a}_2$ , přičemž  $c_{x1} = 2$ ,  $c_{y1} = -5$ ,  $c_{x2} = -3$ ,  $c_{y2} = 1$ . Oba výsledné vektory napište jako uspořádanou dvojici a zakreslete do systému kartézských souřadnic.

**Úkol 7:** Představme si nejjednodušší molekulu, která nás napadne:  $H_2$ . Jako bázové funkce  $\chi_1$  a  $\chi_2$  použijeme dva orbitály 1s, každý je lokalizovaný na jednom jádru. Tyto funkce jsou zakreslené na obrázku 3. Vaším úkolem je vytvořit jejich lineární kombinace  $\phi_1$  a  $\phi_2$  a doplnit je do obrázku 2. V prvním případě jsou rozvojové koeficienty rovny  $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ , v druhém případě jsou rovny  $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ,  $c_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ . Nezapomeňte naznačit znaménko a velikost.

**Úkol 8:** Jedná se v případě funkcí  $\phi_1$  a  $\phi_2$  o orbitály typu  $\sigma$  nebo  $\pi$ ? Který z dvojice orbitalů  $\phi_1$  a  $\phi_2$  má nižší energii?

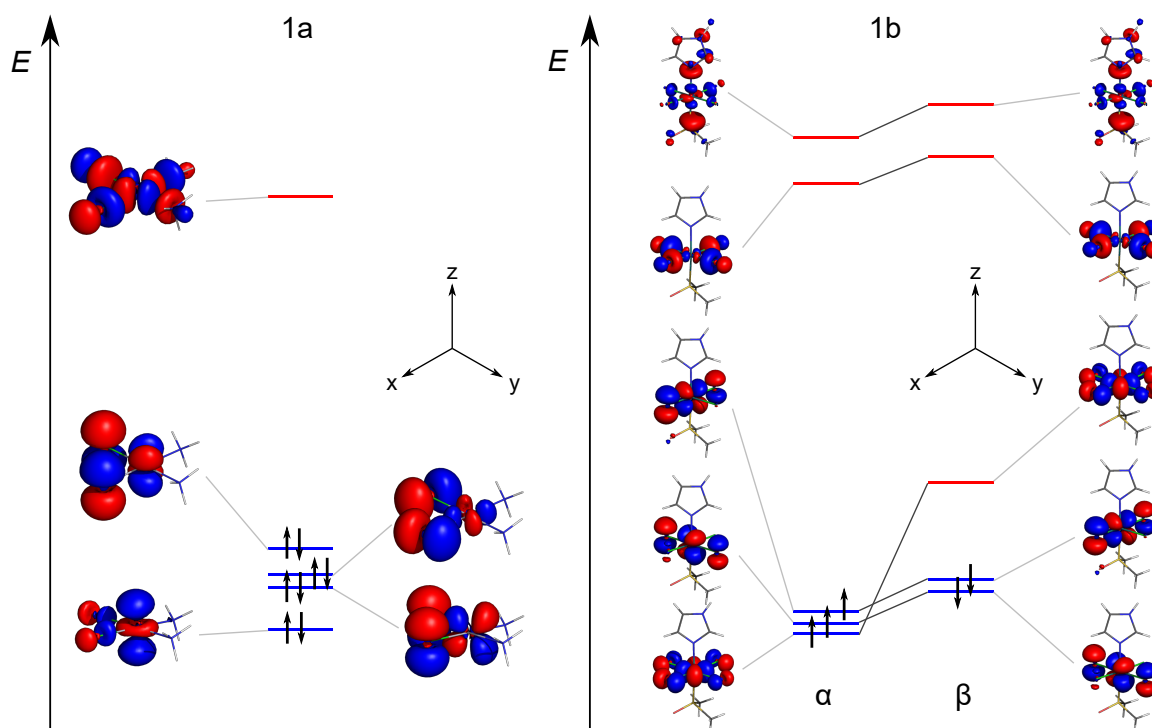
Ačkoliv lze v jednoduchých případech zkonstruovat přibližné molekulové orbitály s tužkou, papírem a několika pravidly; obecně jsou molekulové orbitály (specifikované bázovými funkcemi  $\chi_i$  a rozvojovými koeficienty  $c_{ij}$ ) a jejich energie výsledkem kvantově-chemického výpočtu, který není triviální. Naštěstí jej za nás může udělat počítač.

Na obrázku 4 je znázorněna část diagramu molekulových orbitalů molekul 1a a 1b. Jistě jste zaregistrovali, že v obou diagramech je zobrazeno jen několik nejvyšších obsazených a nejnižších



**Obr. 3:** Atomové orbitály  $\chi_1$  a  $\chi_2$ . Modrá značí kladné znaménko, velikost indikuje velikost koeficientu (v případě čistých funkcí  $\chi_1$  a  $\chi_2$  je to 1).





**Obr. 4:** Diagram molekulových orbitalů 1a a 1b. Energetická škála není u obou diagramů stejná. Nezobrazené níže ležící hladiny jsou vždy obsazené dvěma spárovanými elektrony. V diagramu 1b jsou  $\alpha$  a  $\beta$  spinorbitály se stejnou prostorovou částí spojeny šedou čárkou. To, že mají trochu jinou energii, berete pouze jako důsledek technického provedení výpočtu.

neobsazených energetických hladin. Ve výstupu z výpočtu máme tolik obsazených molekulových orbitalů, kolik má molekula elektronů, a kdybychom je chtěli zobrazit všechny, nemohli bychom se zaměřit na důležité detaily.

**Úkol 9:** Kolik obsazených molekulových orbitalů byste očekávali jako výstup kvantově chemického výpočtu provedeného na molekulách 1a a 1b? Napište, jakým způsobem jste k výsledku dospěli.

Oba diagramy v obrázku 4 zobrazují d-blok, tedy molekulové orbitály, k nimž primárně přispívají d-orbitály kovu.

**Úkol 10:** Zapište elektronovou konfiguraci komplexů 1a a 1b ve formátu  $d^n$ , kde  $n$  je počet d-elektronů.

**Úkol 11:** U každého molekulového orbitalu na obrázku 4 označte, jaký d-orbital ( $d_{z^2}$ ,  $d_{xz}$ ...) k němu přispívá.

Většina molekul, s nimiž se chemik setká, má všechny své orbitály obsazené dvěma elektrony s opačnými spiny. U některých molekul tomu tak není. Typickým příkladem jsou takové molekuly, které obsahují lichý počet elektronů. Do této skupiny látek patří například organické či malé anorganické radikály nebo mnoho komplexů přechodných kovů. Možná se setkali s tím, že pro vlastnosti molekul bývají zásadní hraniční orbitály, tedy ten nejvyšší obsazený a nejnižší

neobsazený. V případě molekul, které nemají všechny elektrony spárované, je velice důležitý orbital, který se označuje SOMO (Singly Occupied Molecular Orbital). To je orbital, který obsahuje nepárový elektron.

**Úkol 12:** Má některý z komplexů 1a nebo 1b nepárové elektrony? Pokud ano, napište, jaký charakter má orbital SOMO (tj. jaký d-orbital kovu k němu přispívá).

**Úkol 13:** Na základě diagramu v obrázku 4 spočítejte spinovou multiplicitu molekuly 1a a 1b. Je komplex 1b vysoko-, nebo nízko-spinový?

Mluvili jsme o různých typech momentu hybnosti a zatím jsme opomněli zmínit, proč nás ta zdánlivě ezoterická veličina tak zajímá. Je to proto, že moment hybnosti u nabitě částice znamená, že daná částice bude mít i magnetický dipólový moment. A to je veličina, jíž můžeme využít při studiu vlastností naší látky. O mnoho více si k tomu řekneme v příští a zároveň poslední sérii. V tuto chvíli si jen představte tu úžasnou věc, že se elektron v důsledku svého spinu chová jako malý magnetek. Přítomnost nepárových elektronů v molekule tedy souvisí s jejími magnetickými vlastnostmi.

**Úkol 14:** Vysvětlete, co to je diamagnetismus a paramagnetismus. Která z molekul 1a a 1b je paramagnetická? Která je diamagnetická?

V příští sérii se již zaměříme na molekuly s nepárovými elektrony a ukážeme si, jak je možné jejich specifické vlastnosti využít při studiu jejich struktury. Krom toho vás bude čekat znovushledání s některými zajímavými molekulami z obrázku 1, prozatím však necháme na vaší představivosti, které z nich to budou ☺

## Zdroje

- Struktury 1191719, 201053 a 889926 z Cambridge Structural Database
- Repisky, M.; Komorovsky, S.; Kadek, M.; Konecny, L.; Ekström, U.; Malkin, E.; Kaupp, M.; Ruud, K.; Malkina, O. L.; Malkin, V. G. ReSpect: Relativistic Spectroscopy DFT Program Package. J. Chem. Phys. 2020, 152 (18), 184101.
- PyMOL Molecular Graphics System, version 2.2.0.0; Schrödinger, LLC, New York, 2017.

## C2 – Kde je Analytík?

*Autorky: Zuzana Bílková a Simona Rozárka Jílková  
 (e-mail: rozarka.jilkova@recetox.muni.cz)*

12 bodů

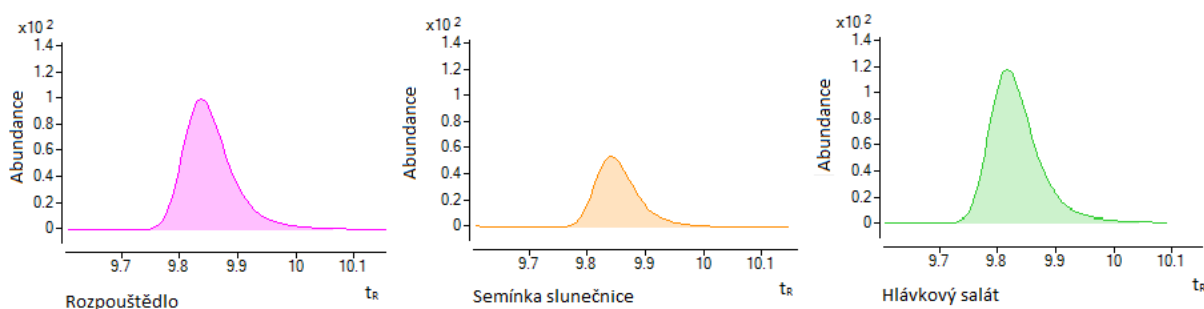
„... 19, 20! Před pikolou za pikolou nikdo nesmí stát, jinak nebudu hrát!“

*Poznámka k následujícímu textu: Pro zmatení nepřítele zde používáme dva pojmy: Analytík a StandAnalytík. Obojí jsou naprosto identické chemické látky. Jen Analytík si žije volně v přírodě a schovává se v různých složkách životního prostředí. Naopak StandAnalytika máme v laboratoři v roztoku v předem jasně daném množství a pomůže nám s validací metody na stanovení Analytika. Přijde Vám to zmatené? Nezoufejte, nažhavte Holmesovské buňky a jdeme na to!*

### Úkol 1: Vyjmenujte alespoň 5 extrakčních technik.

Najít Analytika, to není jen tak! A i když z minula už něco o struktuře Analytika víme, teď nás čeká velké ověřování. Abychom Analytika byli schopni ve vzorcích z terénu najít, musíme v laboratoři vyvinout na jeho hledání metodu. Tedy celý proces jeho hledání od extrakce po HPLC analýzu musíme pořádně ověřit. A také vyladit co nejvíce situací, které by mohly nastat. Takovému postupu se v analytice říká **validace** a sleduje několik parametrů. S některými z nich se během následujících úkolů setkáme.

Celý proces může vypadat tak, že si na pomoc zavoláme Analytíkovo dvojče – standard Analytika (StandAnalytík; stejná sloučenina jako Analytík, jen ho máme v předem známém množství). StandAnalytika přidáme do rozpouštědla a také do jednotlivých extraktů získaných z různých složek životního prostředí (v našem případě např. z hlávkového salátu nebo semínek slunečnice). V takovém vzorku sledujeme, jak se bude StandAnalytík na chromatografickém záznamu chovat. Dalo by se očekávat, že když do rozpouštědla a extraktu ze semínek slunečnice nebo salátu přidáme stejné množství StandAnalytika, tak dostaneme stejné záznamy. Jak to ale dopadlo se podívejte na obrázek 1.



**Obr. 1:** Záznamy StandAnalytika v jednotlivých matricích.

### Úkol 2: Co je hlavní složkou salátu a co semínek slunečnice?

### Úkol 3: Podívejte se na obrázek 1.

- Vysvětlete svými slovy, co na obrázku 1 vidíte (představte si, že se Vaše babička zajímá o to, co to po večerech řešíte za úlohy).
- U které matrice bychom měli zpozornět a proč?

Minule jsem si také řekli, že Analytíka oddělíme od ostatních komponent pomocí HPLC metody. Analytík má ale spoustu kompliců, kteří mu mohou občas pomoci se před námi ukrýt nebo měnit jeho vzhled i během HPLC separace (např. výšku, šířku, plochu píku). Tento rozdíl v záznamech mohou způsobit různé složky matrice. Tomu se říká matriční efekt. Matriční efekt by neměl být větší jak  $\pm 20\%$ , jinak je potřeba opět zpozornět.

**Úkol 4:** Jaký je přibližně matriční efekt u uvedených matic? Uveďte v procentech.

Pokud StandAnalytíka přidáme k salátu ještě před extrakcí, tak můžeme pozorovat výtěžnost metody (často se používá anglický název „recovery“). Z výtěžnosti zjistíme, jestli je metoda pro nalezení Analytíka vhodná a jestli umí Analytíka převést do extrakčního rozpouštědla. Mělo by se mu v rozpouštědle líbit, aby ochotně z matrice přecházel. Výtěžnost se může pohybovat v rozmezí 70–120 %.

**Úkol 5:** Nakreslete, jak by vypadal záznam v případě a) 100% výtěžnosti a b) 50% výtěžnosti (tedy odezva přidaného standardu po extrakci versus odezva přidaného standardu PŘED extrakci).

Množství StandAnalytíka si můžeme uvést jako hmotnost StandAnalytíka (v našem případě v  $\mu\text{g}$ ) obsaženého v 1 ml rozpouštědla.

**Úkol 6:** O jakou veličinu se jedná a jakou bude mít jednotku?

**Úkol 7:** Pokud do 1 ml extraktu matrice přidám 5  $\mu\text{g}$  StandAnalytíka, jaká bude ideální detekovaná... (doplňte veličinu z úkolu 6)?

**Úkol 8:** Jaká by byla nejnížší zjistitelná hodnota v tomhle konkrétním vzorku StandAnalytíka, kterou bychom naší metodou naměřili, pokud by výtěžnost metody byla 70 %?

Naše stroje spolu s extrakčními metodami mají také své limity a množství Analytíka, které jsme schopni stanovit, je omezené. Zkratka pro takový limit je LOQ. Je to nejnížší množství, které jsme schopni stanovit.

**Úkol 9:** Z jakých slov zkratka vychází?

**Úkol 10:** Pokud LOQ naší metody bude 0,05  $\mu\text{g}/\text{ml}$ , povede se nám Analytíka naší metodou stanovit, vezmeme-li 5 g půdy, ve které je schováno 5 ng Analytíka, a provedeme extrakci do 10 ml rozpouštědla? Uvažujte 100% výtěžnost. Odpověď vysvětlete.

**Úkol 11:** Jaké nejmenší množství Analytíka by muselo být v 5 g půdy, abychom jej ještě stanovili při extrakci do 10 ml rozpouštědla? Uvažujte opět 100% výtěžnost.

**Úkol 12:** Popusťte uzdu své fantazie a nakreslete strukturu Analytíka a StandAnalytíka.

**Úkol 13:** Navázili jste si 5,35 g vysušené půdy. Ke vzorku jste přidali 50  $\mu\text{l}$  roztoku StandAnalytíka o koncentraci  $c = 10 \mu\text{g ml}^{-1}$  a provedli extrakci a úpravy vzorku tak, že finální objem vzorku, který je měřen, je 0,5 ml. Samotné měření a vyhodnocení dat vám pro tentokrát provedl analytický chemik a získali jste od něj (pro 0,5ml vzorek, který jste mu dodali) následující výsledky:  $c(\text{StandAnalytík}) = 0,9046 \mu\text{g ml}^{-1}$ ;  $c(\text{Analytík}) = 1,1374 \mu\text{g ml}^{-1}$ .

- a) Jaké množství StandAnalytika jste přidali?
- b) Jaká je výtěžnost metody?
- c) Vypočtete hmotnostní frakci (hmotnostní zlomek) Analytika v půdě. Nezapomeňte vzít v potaz i vypočtenou výtěžnost.

SOVIČKA



SOVIČKA O  
VÁNOCÍCH



SOVIČKA  
NA SILVESTRA



SOVIČKA  
O ZKOUŠKOVÉM

