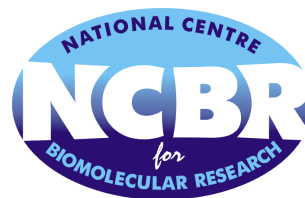




Masarykova univerzita
Přírodovědecká fakulta
Ústav chemie a NCBR



Řešení úkolů 3. série

2. ročník (2011/2012)

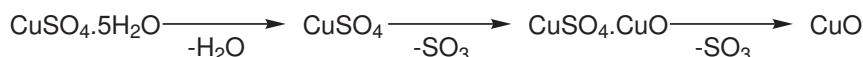
B3 Sol-gelové procesy

Autor: *Zeněk Moravec (e-mail: hugo@chemi.muni.cz)*

15 bodů

1. Řešení úkolů:

- (a) Fyzikální procesy jsou určeny teplotou, například tání. Naproti tomu chemická reakce proběhne v okamžiku, kdy systému dodáme potřebné množství energie, to znamená, že při vyšší rychlosti ohřevu (dodáváme více energie za jednotku času) proběhnou reakce dříve než při pomalejším ohřevu.
- (b) Řešení:



- (c) Řešení:

$$M(\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}) = 249,68 \text{ g mol}^{-1}$$

$$M(\text{CuSO}_4) = 159,60 \text{ g mol}^{-1}$$

$$M(\text{CuSO}_4 \cdot \text{CuO}) = 239,15 \text{ g mol}^{-1}$$

$$M(\text{CuO}) = 79,55 \text{ g mol}^{-1}$$

$$w_1 = \frac{159,60 \text{ g mol}^{-1}}{249,68 \text{ g mol}^{-1}} \times 100\% = 64\%$$

$$w_2 = \frac{239,15 \text{ g mol}^{-1}}{2 \times 249,68 \text{ g mol}^{-1}} \times 100\% = 48\%$$

$$w_3 = \frac{79,55 \text{ g mol}^{-1}}{249,68 \text{ g mol}^{-1}} \times 100\% = 32\%$$

Hmotnostní zlomek pro první a třetí děj odpovídají TG křivce. U druhého děje shoda není, protože se nerozloží očekávaných 50 % síranu měďnatého, ale větší podíl.

2. Řešení úkolů:

- (a) Při nižší teplotě se molekuly plynu pohybují pomaleji a je větší pravděpodobnost, že po dopadu na povrch zůstanou zachyceny. Při teplotě varu plynu dochází v pórech ke kapilární kondenzaci.
- (b) Slabé, nevazebné interakce. Vznikají v nepolárních molekulách, které nemají permanentní dipól. Van der Waalovy síly využívají např. gekoni, aby mohly šplhat po svislých, hladkých plochách.
- (c) Interakce mezi vzorkem a plynem je zpravidla silnější než mezi dvěma vrstvami plynu (pro fyzisorpci se využívají inertní plyny). Proto je i pravděpodobnější, že se plyn bude vázat nejprve na povrch vzorku a až ten bude zaplněn, tak dojde k tvorbě druhé vrstvy.
- (d) Jde o rovnovážný děj (adsorpce-desorpce), při nižší teplotě se rovnováha posouvá směrem k adsorpci.

3. Řešení úkolů:

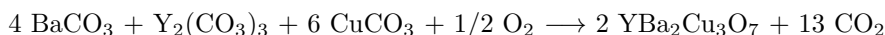
- (a) Katalyzátory jsou látky, které do reakce vstoupí, změny reakční mechanismus a na konci reakce vystoupí nezměněny. Výsledkem jejich působení je změna kinetiky reakce.
Homogenní katalyzátory jsou ve stejné fázi jako reaktanty. Heterogenní naopak existují v jiné fázi než reaktanty – nejčastěji jsou pevné a reaktanty jsou kapalné nebo plynné. Ke katalýze pak dochází na fázovém rozhraní.
- (b) Protože katalýza probíhá na povrchu a v pórech katalyzátoru. Aby ke katalýze mohlo dojít, musí póry velikostí a tvarem vyhovovat reaktantům a reakčním meziproductům.
Je-li heterogenní katalyzátory často pracují za vysoké teploty, je nutné znát jejich chování při zahřívání.
- (c) Nejprve dojde k navázání oxidu siřičitého na povrch katalyzátoru a tvorbu komplexu. V dalším kroku dojde k redukci V2O5 a uvolnění SO3. Vzniklá vakance na povrchu je okamžitě zaplněna kyslíkem z atmosféry.

4. Řešení úkolů:

- (a) Supravodiče jsou materiály, které za vhodných podmínek nevykazují ohmický odpor, tzn. že dokáží vést elektrický proud beze ztrát. Do skupiny supravodičů 1. typu patří kovy a polokovy, které jsou vodivé za normální teploty. Vyžadují ochlazení na velmi nízkou teplotu, aby se utlumily molekulární vibrace na úroveň umožňující nepřerušované proudění elektronů, což je podmínka supravodivosti daná BCS teorií. Supravodiče 1. typu se někdy nazývají jako měkké supravodiče. Tyto látky byly zkoumány jako první, a vyžadují nejnižší teploty pro vznik supravodivosti. Vykazují velmi ostrý přechod do supravodivého stavu a také perfektní diamagnetismus (Meissner-Ochsenfeldův efekt).

Mezi supravodiče 2. typu patří sloučeniny kovů a slitiny. Patří sem např. dnes nejnadějnější supravodiče, které mají strukturu perovskitu. Mají vyšší T_c než supravodiče 1. typu. Supravodiče 2. typu – označované jako tvrdé supravodiče – se od 1. typu odlišují tím, že přechod z normálního do supravodivého stavu probíhá přes tzv. přechodový stav. Také je u nich možné pronikání externího magnetického pole povrchem. To zapříčinilo vznik nových pojmů jako supravodivé struny (linky) a toky vírů v mřížkou.

- (b) YBCO je zkratka pro velmi nadějnou skupinu supravodivých materiálů založených na smíšeném oxidu $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, který má strukturu perovskitu.



Vlastnosti těchto materiálů – kritická teplota, kritické pole, atd. – jsou silně ovlivněny stechiometrií, která se často odchyluje od ideálního složení. Sol-gelové syntézy umožňují získat, díky homogennímu výchozímu stavu, produkt o žádané stechiometrii.

5. Řešení úkolů:

- (a) Řešení:

Hydroxylapatit – $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$

Fluoroapatit – $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$

Chloroapatit – $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$

Karbonátohydroxylapatit – $\text{Ca}_5(\text{PO}_4, \text{CO}_3)_3(\text{OH})$

Karbonátfluoroapatit – $\text{Ca}_5(\text{PO}_4, \text{CO}_3)_3\text{F}$

Stronciumapatit – $(\text{Sr}, \text{Ca})_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{OH})$

- (b) Alergická reakce organismu na cizí předmět, která může vést až k odmítnutí implantátu organismem. Může se projevit i několik měsíců po implantaci, pacient zpravidla pociťuje bolest. Implantát je nutné vyjmout a nahradit jiným. Další možnou negativní reakcí organismu na cizí implantát je vznik zánětlivých ložisek způsobený přítomností mikroskopických částic na povrchu předmětu.
- (c) Nejsnadnějším a nejúčinnějším způsobem je využití kovových materiálů jako jádra implantátu, který nepřijde s imunitním systémem do styku a na povrch tohoto jádra se některou z dříve zmíněných metod nanese biokompatibilní povlak (keramika na bázi $\text{Ca}(\text{PO}_4)_3$).

C2 Spinová alchymie

Autor: Lukáš Žídek (email: lzidek@chemi.muni.cz)

15 bodů

1. 2818 Hz (2 body)
2. ± 976 Hz (1 bod)
3. ± 1836 Hz, ± 1016 Hz (2 body)
4. 1836 Hz, 1016 Hz (1 bod)
5. 0,16 nm (1 bod)

6. 5 bodů:

Frekvence vodíku α / ppm	Aminokyselina	Frekvence vodíku v peptidové vazbě / ppm	Aminokyselina
3.57	K 12	7.40	R 20
3.63	Q 19	7.44	L 15
3.74	L 15	7.49	H 22
3.80	G 3	7.55	A 14
3.93	V 21	7.62	H 18
3.96	R 17	7.72	C 5
4.00	R 7	7.77	V 21
4.03	R 20	7.81	R 17
4.06	V 10	7.85	K 23
4.10	A 14	7.91	E 11
4.15	S 13	8.03	S 8
4.20	G 3	8.29	Q 19
4.23	S 16	8.37	S 16
4.26	K 23	8.47	R 7
4.30	H 18	8.55	N 24
4.35	E 6	8.61	E 6
4.39	C 2	8.65	F 9
4.45	L 4	8.70	K 1
4.60	N 24	8.78	K 12
4.65	K 1	8.95	V 10
4.70	F 9	8.99	S 13
4.74	H 22	9.06	C 2
4.83	E 11	9.19	G 3
4.92	C 5	9.30	L 4
5.18	S 8		

7. E11–H22 (1 bod)

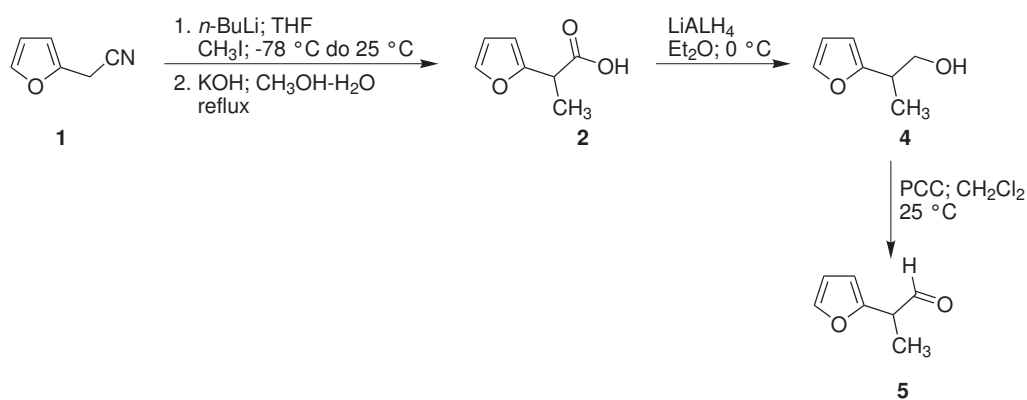
D2 – Organická syntéza – léčiva, biologicky aktivní látky

Autor: Kamil Paruch (e-mail: paruch@chemi.muni.cz)

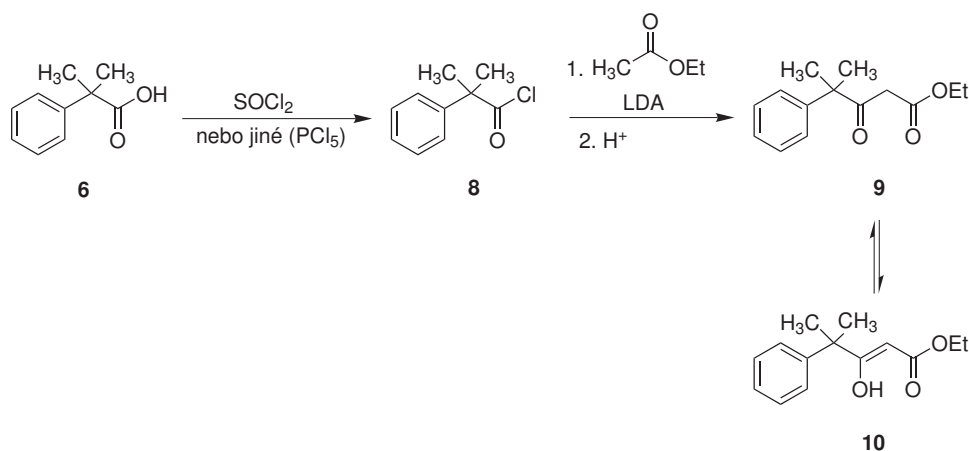
12 bodů

1. Protonové NMR spektrum obsahuje šest signálů. Tři signály furanového kruhu při transformaci (**1** na **2**) nedoznaly větších změn a pro identifikaci produktu nejsou významné. Zbylé signály jsou popsány v tabulce. **Multiplicita methylové skupiny byla chybně uvedena jako singlet. Za tuto chybu se omlouváme. (3 b.)**

chemický posun (ppm)	multiplicita signálu	počet atomů H
1,56	dublet	3
4,05	kvartet	1
cca 11	singlet	1



2. Nedalo, voda s butyllithiem prudce reaguje za rozkladu (**1 b.**).
3. Viz předešlé schéma (**1 b.**).
4. Produkt viz předešlé schéma, místo PCC např. TPAP/NMO, Swernova oxidace, PDC, Dess-Martinovo činidlo a další (**2 b.**).
5. Viz schéma (**1 b.**):



6. Viz schéma (**3 b.**).
7. Keto-enol tautomerie (**1 b.**)

Y – Doplnková úloha: Ropa

Autor: Jaromír Literák (e-mail: literak@chemi.muni.cz)

10 bodů

- Vhodným kritériem pro rozlišení obnovitelných a neobnovitelných zdrojů může být čas potřebný k obnově zdroje. Pokud je srovnatelný nebo kratší než je délka lidského života, můžeme hovořit o obnovitelném zdroji (**1 b.**).
- Ropa má vedle vysokého obsahu energie několik dalších předností. Je to na jedné straně relativní snadnost jejího získávání (vyjádřená jak její EroEI, tak nízkou cenou), na druhé straně její kapalné skupenství, které z ropy a látek z ní odvozených činí ideální palivo pro dopravu (snadno se s nimi manipuluje, konstrukce motoru je relativně jednoduchá). Těžko si představit letadlo poháněné černým uhlím, osobní automobil využívající uhlí by byl myslitelný, ale určitě by byl náročnější na obsluhu a údržbu ve srovnání se současnými automobily. Zemní plyn jako palivo v dopravě by vyžadoval složitější technologie (doprava, skladování, distribuce, samotný pohon) (**1 b.**).
- Uvádí se, že ropný zlom v Československu nastal v roce 1953 (**0,5 b.**).
- Jedná se o ropné pole Ghawar. Pole se nachází v druhé fázi těžby, kdy je potřeba jednoduchými technikami zvyšovat tlak na ropu – jedná se především o injektáž vody nebo plynu. Ve třetí fázi přichází na řadu použití speciálních technik, např. vhnání rozpouštědel nebo látek, které mobilizují uhlovodíky (**1,5 b.**).
- Může se jednat o kombinaci nástupu nových technologií těžby, umožňujících vytěžit více ropy ze stávajících vrtů, objevování a těžba nových ložisek (hlubokomořské dno) a především pokles spotřeby ropy v 70. letech 20. století v důsledku ropného embarga států OPEC (**1 b.**).
- Příklad zcela nerealisticky předpokládá, že člověk je schopen delší dobu podávat výkon 100 W a ještě to dělat za odměnu 100 Kč·h⁻¹. Aby člověk takto vykonal práci 1 kWh, musel by pracovat 10 hodin. Mzda člověka (a cena lidské práce) je tudíž 10 h × 100 Kč·h⁻¹ = **1.000 Kč.** (**1 b.**)

$$1 \text{ kWh} = 1.000 \times 1 \text{ J} \cdot \text{s}^{-1} \times 3600 \text{ s} = 3,6 \text{ MJ}$$

Pro získání této energie potřebujeme spálit následující množství benzínu:

$$m = \frac{3,6 \text{ MJ}}{32 \text{ MJ} \cdot \text{kg}^{-1}} = 0,1125 \text{ kg} = 112,5 \text{ g}$$

Předpokládejme, že hustota benzínu je 0,7 g·cm⁻³.

$$V = \frac{112,5 \text{ g}}{0,7 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}} \doteq 160 \text{ cm}^{-3} = 0,16 \text{ dm}^{-3}$$

Cena tohoto množství benzínu pak je 0,16 dm⁻³ × 36 Kč·dm⁻³ = **5,8 Kč** (**1 b.**)

Autorovi dodává do domácnosti elektřinu E.ON, cena 1 kWh činí po započtení všech souvisejících poplatků **4,59 Kč.** (**1 b.**)

- Běžné fotovoltaické panely mají účinnost přeměny světla na elektrickou energii kolem 10 %. Vyšší účinnost obvykle mají fotovoltaické panely pro speciální aplikace (solární panely družic), které jsou také výrazně dražší. Plocha, kterou by panely musely zaujímat, aby poskytovaly výkon 10 kW je:

$$S = \frac{10.000 \text{ W}}{50 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \times 0,1} = \mathbf{2.000 \text{ m}^2} \text{ (1 b.)}$$

Pro rostliny s účinností záchytu světelné energie 0,5 %:

$$S = \frac{10.000 \text{ W}}{50 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \times 0,005} = \mathbf{40.000 \text{ m}^2} \text{ (1 b.)}$$