

Masarykova univerzita

Přírodovědecká fakulta



Vzdělávací ikurz pro budoucí chemiky

Řešení úkolů 4. série

9. ročník (2018/2019)

S7 – Plovoucí chemik Vašek (sedmá úvodní úloha)

Autor: Jiří Vlach (e-mail: vlach.jura@seznam.cz)

5 bodů

1. Objem bazénu vypočítáme ze zadaných rozměrů:

$$V = 25 \text{ m} \cdot 15 \text{ m} \cdot 2 \text{ m} = 750 \text{ m}^3 = 750\,000 \text{ dm}^3$$

Obsah chloru vypočítáme vynásobením objemu obsahem chloru, tedy:

$$m = V \cdot c_m = 750\,000 \text{ dm}^3 \cdot 0,5 \text{ mg dm}^{-3} = 375\,000 \text{ mg} = 375 \text{ g}$$

V bazénu je tedy 375 g chloru.

(0,75 b.)

2. Pro výpočet se vychází ze stavové rovnice ideálního plynu:

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

Kterou lze vyjádřit jako:

$$p \cdot V = \frac{m}{M} \cdot R \cdot T$$

Z čehož vyjádříme objem:

$$V = \frac{m \cdot R \cdot T}{M \cdot p}$$

 $M = 70,9 \text{ g mol}^{-1}$ (plynný chlor je Cl_2) $R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 8,314 \text{ m}^3 \text{ Pa K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $T = 28 \text{ }^\circ\text{C} = 301,15 \text{ K}$ $p = 1 \text{ atm} = 101\,325 \text{ Pa}$ $m = 375 \text{ g}$

Po dosazení:

$$V = \frac{375 \text{ g} \cdot 8,314 \text{ m}^3 \text{ Pa K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \cdot 301,15 \text{ K}}{101\,325 \text{ Pa} \cdot 70,9 \text{ g mol}^{-1}} = 0,1307 \text{ m}^3 = 130,7 \text{ dm}^3$$

Objem v litrech (dm^3) podělený objemem balónek dá jejich počet, tedy 13,07 desetilitrových balónek.**(1,25 b.)**

3. Zde jsem si bylo potřeba uvědomit, že s počtem sněžených lasagní neroste pouze Vaškova hmotnost, ale i objem. Aby se Vašek potopil, jeho hustota se musí aspoň rovnat hustotě vody, dostaneme tedy výraz:

$$\rho_{\text{voda}} = \rho_{\text{Vašek}}$$

Abychom mohli spočítat $\rho_{\text{Vašek}}$, musíme si vyjádřit objem a lasagní Vaška $V_{\text{Vašek+las}}$, hmotnost Vaška a lasagní $m_{\text{Vašek+las}}$, objem lasagní V_{las} a počet porcí lasagní se označí jako x .

$$V_{\text{las}} = \frac{m_{\text{las}}}{\rho_{\text{las}}}$$

$$V_{\text{Vašek}} = \frac{m_{\text{Vašek}}}{\rho_{\text{Vašek}}}$$

jelikož se $V_{\text{Vašek}}$ při sněžení jedné porce zvětší o V_{las} a jelikož určitě bude potřebovat sníst porcí více (x), vyjádříme $V_{\text{Vašek+las}}$ jako:

$$V_{\text{Vašek+las}} = \frac{m_{\text{Vašek}}}{\rho_{\text{Vašek}}} + x \cdot \left(\frac{m_{\text{las}}}{\rho_{\text{las}}} \right)$$

Hmotnost Vaška naroste vždy o hmotnost lasagní, tedy:

$$m_{\text{Vašek+las}} = m_{\text{Vašek}} + x \cdot m_{\text{las}}$$

Vyjádřený objem i hmotnost Vaška dosadíme do rovnice pro hustotu Vaška:

$$\rho_{\text{Vašek}} = \frac{m_{\text{Vašek+las}}}{V_{\text{Vašek+las}}} = \frac{m_{\text{Vašek}} + x \cdot m_{\text{las}}}{\frac{m_{\text{Vašek}}}{\rho_{\text{Vašek}}} + x \cdot \frac{m_{\text{las}}}{\rho_{\text{las}}}}$$

Tuto rovnici lze dosadit do první rovnice a dostaneme:

$$\rho_{\text{voda}} = \frac{m_{\text{Vašek}} + x \cdot m_{\text{las}}}{\frac{m_{\text{Vašek}}}{\rho_{\text{Vašek}}} + x \cdot \frac{m_{\text{las}}}{\rho_{\text{las}}}}$$

Ze které vyjádříme x :

$$\rho_{\text{voda}} \cdot \left(\frac{m_{\text{Vašek}}}{\rho_{\text{Vašek}}} + x \cdot \frac{m_{\text{las}}}{\rho_{\text{las}}} \right) = m_{\text{Vašek}} + x \cdot m_{\text{las}}$$

Po roznásobení dostaneme:

$$\rho_{\text{voda}} \cdot \frac{m_{\text{Vašek}}}{\rho_{\text{Vašek}}} + \rho_{\text{voda}} \cdot x \cdot \frac{m_{\text{las}}}{\rho_{\text{las}}} = m_{\text{Vašek}} + x \cdot m_{\text{las}}$$

Převedeme členy s x na pravou stranu:

$$\rho_{\text{voda}} \cdot \frac{m_{\text{Vašek}}}{\rho_{\text{Vašek}}} - m_{\text{Vašek}} = x \cdot m_{\text{las}} - \rho_{\text{voda}} \cdot x \cdot \frac{m_{\text{las}}}{\rho_{\text{las}}}$$

Na pravé straně vytkneme $x \cdot m_{\text{las}}$:

$$\rho_{\text{voda}} \cdot \frac{m_{\text{Vašek}}}{\rho_{\text{Vašek}}} - m_{\text{Vašek}} = x \cdot m_{\text{las}} \cdot \left(1 - \frac{\rho_{\text{voda}}}{\rho_{\text{las}}}\right)$$

A podělíme členem:

$$m_{\text{las}} \cdot \left(1 - \frac{\rho_{\text{voda}}}{\rho_{\text{las}}}\right)$$

Získáme:

$$x = \frac{\rho_{\text{voda}} \cdot \frac{m_{\text{Vašek}}}{\rho_{\text{Vašek}}} - m_{\text{Vašek}}}{m_{\text{las}} \cdot \left(1 - \frac{\rho_{\text{voda}}}{\rho_{\text{las}}}\right)}$$

Po dosazení hodnot ($\rho_{\text{voda}}=996 \text{ kg m}^{-3}$; $\rho_{\text{Vašek}} = 985 \text{ kg m}^{-3}$; $\rho_{\text{las}} = 1040 \text{ kg m}^{-3}$; $m_{\text{Vašek}} = 75 \text{ kg}$; $m_{\text{las}} = 0,4 \text{ kg}$) získáme výsledný počet lasagní, tedy:

$$x = \frac{996 \text{ kg m}^{-3} \cdot \frac{75 \text{ kg}}{985 \text{ kg m}^{-3}} - 75 \text{ kg}}{0,4 \text{ kg} \cdot \left(1 - \frac{996 \text{ kg m}^{-3}}{1040 \text{ kg m}^{-3}}\right)} = 49,5 \text{ porcí lasagní}$$

Vašek tedy musí sníst aspoň 50 celých porcí, aby přestal plavat na vodě.

(3,00 b.)

S8 – Od horníka chemikem! (osmá úvodní úloha)

Autor: Jiří Doležel (e-mail: dolezelj99@gmail.com)

8 bodů

1. Kolik gramů čistého zlata obsahovaly valouny, jestliže průměrně měly 16 karátů? Kolik peněz by Lojza dostal, kdyby všechno zlato prodal? Počítejte s průměrnou cenou čistého zlata 28 tisíc Korun českých za římskou unci.

Výpočet množství čistého zlata je přímá úměra. Zlato ve své nejmocnější formě je popisováno jako 24karátové (značí se 24kt). Jestliže váží vzorek 16kt zlata 500 g, pak hmotnost čistého zlata je:

$$m(24\text{kt Au}) = \frac{16\text{ kt}}{24\text{ kt}} \cdot m(16\text{kt Au}) = \frac{2}{3} \cdot 500\text{ g} \approx 333,3\text{ g}$$

Pro výpočet zisku z prodaného zlata musíme nejdříve převést gramy na římské unce. Pro převod na římské unce platí: 1 unce = 27,28 g.

$$m(\text{Au v uncích}) = \frac{m(\text{Au})}{m(\text{unce})} = \frac{333,3\text{ g}}{27,28\text{ g/unce}} \approx 12,22\text{ římských uncí}$$

Řešení pro více používanou jednotku hmotnosti zlata – troyskou unci bylo ohodnoceno plným počtem bodů.

Jestliže je cena jedné unce zlata 28 tisíc Kč, pak celkový zisk je roven:

$$\text{zisk} = m(\text{Au v uncích}) \cdot \text{cena}(\text{Au})$$

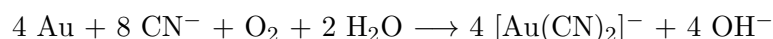
$$\text{zisk} = 12,22\text{ římských uncí} \cdot 28\,000\text{ Kč/římská unce} \approx 342\,000\text{ Kč}$$

(2,0 b.)

2. Jaká látka využívaná k louhování zlata je nebezpečná a co způsobuje? Zapište chemickou rovnici louhování zlata.

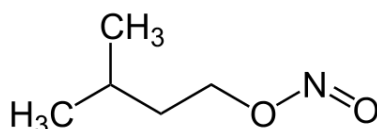
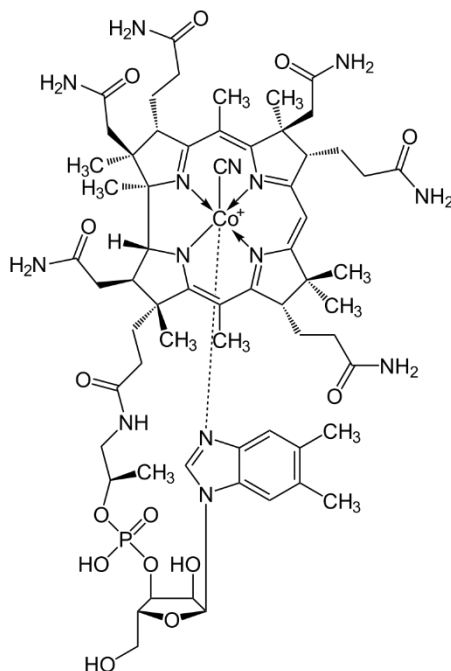
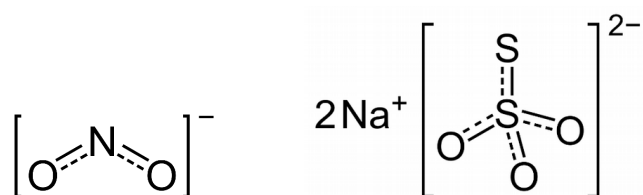
Nebezpečnou látkou jsou obecně kyanidy (kyanid sodný či kyanid draselný). Kyanidový anion v lidském těle blokuje mitochondriální enzymy dýchacího řetězce (cytochrom c oxidasy, jinak nazývaný jako komplex IV), čímž dochází k inhibici buněčného dýchání. Poškození této metabolické dráhy vede k ischemii nervové soustavy a srdeční svaloviny, ke křečím a při vystavení vysoké koncentraci kyanidů může dojít i k smrti.

Rovnice louhování zlata:

**(2,5 b.)**

3. Jakou protilátku použila doktorka Klotylda? Uveďte včetně strukturního vzorce.

Protilátek pro otravu kyanidy je hned několik. Mezi ty nejčastější patří dusitan sodný, thiosíran sodný, isoamyl-nitrit (isopentylester nebo také 3-methylbutylester kyseliny dusité) či hydroxykobalamin.



(0,6 b.)

4. Jak se obecně nazývá léčba zlatem a jeho sloučeninami?

Tento typ léčby se obecně označuje jako chrysotherapie či aurotherapie.

(0,5 b.)

5. Jmenujte alespoň jedno onemocnění, na jehož léčbu může být použit Auranofin.

Používá se na převážně na léčbu revmatoidní artritidy. Dále se používá na léčbu HIV, tuberkulózy a amebiázy, avšak léčba těchto nemocí Auranofinem je v několika zemích světa stále ve fázi výzkumu.

(0,4 b.)

6. Kolik balení léčiva by byl Lojza schopen připravit, jestliže v jednom balení je 20 pilulek? Pro jednodušší výpočet uvažujte 30% výtěžek Auranofinu ze zlatých valounů. Kolik by Lojza vydělal, kdyby prodal takovéto množství léků? Počítejte s cenou 2000 Kč za jedno balení.

V tomto případě je jediným uvažovaným reaktantem čisté zlato z Lojzových valounů. Hmotnost čistého zlata ve valounech byla vypočítána v prvním příkladě: 333,3 g.

$$n(\text{Au}) = \frac{m(\text{Au})}{M(\text{Au})} = \frac{333,3 \text{ g}}{196,97 \text{ g mol}^{-1}} = 1,69 \text{ mol}$$

Auranofin (dále jako lék) je připraven ze zlatých valounů, přičemž souhrný výtěžek je 30 %. Tedy můžeme říci, že pouze 30 % původního látkového množství čistého zlata bylo převedeno na Auranofin. Takto můžeme vypočítat získanou hmotnost Auranofinu.

$$m(\text{lék}) = n(\text{lék}) \cdot M(\text{lék}) = 0,30 \cdot n(\text{Au}) \cdot M(\text{lék}) = 0,30 \cdot 1,69 \text{ mol} \cdot 196,97 \text{ g mol}^{-1} = 344,94 \text{ g}$$

Množství léku v jedné pilulce je 3 mg (tedy 3×10^{-3} g), díky čemuž je možné spočítat celkový počet pilulek.

$$N(\text{pilulek}) = \frac{m(\text{lék})}{m(\text{léku v pilulce})} = \frac{344,94 \text{ g}}{3 \times 10^{-3} \text{ g/pilulka}} = 114\,980 \text{ pilulek}$$

Jestliže je v jednom balení 20 pilulek, pak celkový počet balení je roven:

$$N(\text{balení}) = \frac{N(\text{pilulek})}{N(\text{pilulek v balení})} = \frac{114\,980}{20} = 5\,749 \text{ balení}$$

Pokud je cena 2 000 Kč za jedno balení, pak celkový obnos peněz, který by Lojza obdržel, je:

$$\text{obnos} = N(\text{balení}) \cdot \text{cena}(\text{balení}) = 5\,749 \cdot 2\,000 \text{ balení} \cdot \text{Kč/balení} \approx 11,50 \text{ milionu Kč}$$

(2,0 b.)

A4 – Environmentální chemie

Autorky: *Simona Rozárka Jílková (e-mail: jilkova@recetox.muni.cz)*
Lisa Melymuk (e-mail: melymuk@recetox.muni.cz)

13 bodů

1. Které chemické látky mají vyšší koncentraci ve vzduchu než jsou doporučené limity? Odpovězte pro každou část hotelu zvlášť. Pro zjištění daných limitů použijte Tabulku 1 v příloze.

| Chemikálie | Prahová koncentrace ve vzduchu | Stará část hotelu | Přesahuje? | Nová část hotelu | Přesahuje? |
|--|--------------------------------|-------------------------|------------|-------------------------|------------|
| Formaldehyd | 0,1 mg/m ³ | 0,003 μg/m ³ | NE | 0,15 μg/m ³ | NE |
| Trichlorethylen (TCE) | 2,3 μg/m ³ | 0,32 μg/m ³ | NE | 1,7 μg/m ³ | NE |
| Oxid uhelnatý | 7 mg/m ³ | 35 mg/m ³ | ANO | 4 mg/m ³ | NE |
| Naftalen | 0,01 mg/m ³ | 0,1 μg/m ³ | NE | 0,009 μg/m ³ | NE |
| Benzo[a]pyren (BAP) | 0,012 ng/m ³ | 0,02 ng/m ³ | ANO | 0,004 ng/m ³ | NE |
| Chlorpyrifos | 0,2 mg/m ³ | 0,31 mg/m ³ | ANO | 0,32 mg/m ³ | ANO |
| 2,4-Dichlorfenoxycetová kyselina (2,4-D) | 10 mg/m ³ | 0,1 mg/m ³ | NE | 0,12 mg/m ³ | NE |

(1,0 b.)

2. Pro chemikálie, které překročily limity pro vnitřní vzduch, vypočítejte jejich hmotnostní zlomek v prachu a jejich množství na oknech. Počítejte se systémem, který je v rovnováze.

Vstupy:

$$f_{OM-prach} = 0,2$$

$$\rho_{prach} = 2 \times 10^6 \text{ g/m}^3$$

$$f_{OM-okno} = 0,3$$

$$t = 5 \times 10^{-8} \text{ m}$$

| Chemikálie | $\log K_{OA}$ | K_{OA} |
|---------------------|---------------|-----------------------|
| Oxid uhelnatý | 1,21 | 16,2181 |
| Benzo[a]pyren (BAP) | 10,3 | $2,00 \times 10^{10}$ |
| Chlorpyrifos | 10,6 | $3,98 \times 10^{10}$ |

Stará část hotelu

| Chemikálie | X_{prach} | S_{film} |
|---------------------|-----------------------|-----------------------|
| Oxid uhelnatý | $5,68 \times 10^{-8}$ | $8,51 \times 10^{-9}$ |
| Benzo[a]pyren (BAP) | $3,99 \times 10^{-8}$ | $5,99 \times 10^{-9}$ |
| Chlorpyrifos | 1,23 | 0,185 |

Nová část hotelu

| | | |
|--------------|-------------|------------|
| Chemikálie | X_{prach} | S_{film} |
| Chlorpyrifos | 1,27 | 0,191 |

(5,0 b.)

3. Podívejte se na propagační brožuru hotelu a pro každý obrázek (čísla 1–8) zjistěte, jaké vybavení nebo činnosti mohou být zdrojem naměřených chemických látek. Využijte např. informace v Tabulce 1.

| | | | | | | |
|---|--------------|-------|----------------|----------------|----------|----------------|
| 1 | Formaldehyd | TCE | CO | Naftalen | BAP | (Chlorpyrifos) |
| 2 | Formaldehyd | TCE | CO | Naftalen | BAP | (Chlorpyrifos) |
| 3 | Formaldehyd | TCE | (Chlorpyrifos) | | | |
| 4 | Chlorpyrifos | 2,4-D | BAP | Naftalen | (CO) | |
| 5 | Chlorpyrifos | 2,4-D | BAP | Naftalen | (CO) | |
| 6 | Formaldehyd | TCE | Naftalen | (Chlorpyrifos) | | |
| 7 | Formaldehyd | TCE | Naftalen | (Chlorpyrifos) | | |
| 8 | Formaldehyd | TCE | CO | BAP | Naftalen | (Chlorpyrifos) |

(3,0 b.)

4. Pomozte jí s výpočtem denního příjmu pro oxid uhelnatý jak pro novou, tak pro starou část hotelu. Uvědomte si, že oxid uhelnatý je plyn, a tedy se bude jednat o inhalační expoziční cestu.

| | |
|-------------------|----------------|
| Stará část hotelu | 4,98 mg/(kg d) |
| Nová část hotelu | 0,57 mg/(kg d) |

(2,0 b.)

5. Porovnejte vypočtené hodnoty DI s uvedenou RfD a rozhodněte, zda zvýšené koncentrace oxidu uhelnatého mohou být pro zdraví škodlivé. Uvažujte typického hosta: dospělého s hmotností 70 kg.

Referenční dávka (vyčteno ze zadání):

$$RfD_{CO} = 4,58 \text{ mg}/(\text{kg den})$$

Denní příjem oxidu uhelnatého (vypočteno v Úkolu 4):

$$DI_{\text{Stará část}} = 4,98 \text{ mg}/(\text{kg den})$$

$$DI_{\text{Nová část}} = 0,569 \text{ mg}/(\text{kg den})$$

Denní příjem oxidu uhelnatého ve staré části budovy je mírně vyšší než referenční dávka a proto toto inhalované množství může být zdraví škodlivé. Naopak v nové části budovy je denní příjem nižší než referenční dávka a proto toto inhalované množství považujeme za bezpečné, zdraví neškodné.

(1,0 b.)

B4 – Bambusurily – Fanda a konec pohádky

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

13 bodů

1. Analytická chemie

kvalitativní – jaké látky (v našem případě anionty) vzorek obsahuje

kvantitativní – jaké množství analytu (aniontu) vzorek obsahuje, tj. nejčastěji koncentrace.

(1,5 b.)

2. Řešení:

| Anion | IO_4^- | I^- | SCN^- | Br^- | HSO_4^- | CN^- | NO_3^- | ClO_4^- | BF_4^- |
|---------------------|-----------------|--------------|----------------|---------------|------------------|---------------|-----------------|------------------|-----------------|
| δ/ppm | 5,695 | 5,668 | 5,639 | 5,609 | 5,589 | 5,504 | 5,437 | 5,380 | 5,324 |

δ – chemický posun

Některé posuny jsou velice blízko ($\text{Br}^- \times \text{Cl}^-$, $\text{CN}^- \times \text{ReO}_4^-$), jiné se o něco málo liší od přehledu ve studijním materiálu (HSO_4^-), na což byl brán ohled při opravování. To, že se liší, ale neznamená, že je v obrázku nebo v přehledu chyba, jsou to dvě na sobě nezávislá měření a hodnota chemického posunu nemusí vždy přesně na 4 platné číslice odpovídat hodnotě naměřené v jiném experimentu, jsou si ale velice blízké.

Signály v levé části spektra tvoří opravdu pětiici na sobě nezávislých signálů, nejedná se o kvintet, jak se nazývá pík rozštěpený čtyřmi vodíky.

Experimentální hodnoty jsou převzaty z článku jmenovaného ve studijním materiálu.

(2,0 b.)

3. Řešení:

$$\begin{aligned}
 M_{\check{C}} &= ?; M_{\text{H}} = ? & i \in \{\text{H}, \check{C}\} \\
 N_{\text{H}} &= 50; m_{\text{H}} = 12,17 \text{ g} & \text{H} = \text{hrášek}, \check{C} = \text{čočka} \\
 N_{\check{C}} &= 60; m_{\check{C}} = 4,25 \text{ g}
 \end{aligned}$$

$$M_i = \frac{m_i}{n_i} = \frac{m_i \cdot N_A}{N_i}$$

$$M_{\check{C}} = \frac{4,25 \cdot 6,022 \times 10^{23}}{60} \text{ g mol}^{-1} = 4,2656 \times 10^{22} \text{ g mol}^{-1}$$

$$M_{\text{H}} = \frac{12,17 \cdot 6,022 \times 10^{23}}{50} \text{ g mol}^{-1} = 1,4658 \times 10^{23} \text{ g mol}^{-1}$$

Bylo vypočteno, že molární hmotnost čočky je $4,27 \times 10^{22} \text{ g mol}^{-1}$ a molární hmotnost hrášku je $1,47 \times 10^{23} \text{ g mol}^{-1}$.

(1,5 b.)

4. Řešení:

$$w = ? \%$$

$$\frac{n_{\text{H}} = n_{\text{Č}} = n}{VZ = \text{vzorek}}$$

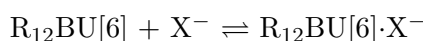
$$w = \frac{m_{\text{H}}}{m_{VZ}} = \frac{n \cdot M_{\text{H}}}{n \cdot M_{\text{H}} + n \cdot M_{\text{Č}}} = \frac{M_{\text{H}}}{M_{\text{H}} + M_{\text{Č}}}$$

$$w = \frac{1,4658 \times 10^{23}}{1,4658 \times 10^{23} + 4,2656 \times 10^{22}} \cdot 100 \% = 77,5 \%$$

V ekvimolární směsi čočky a hrášku je 77,5 hm. % hrášku.

(1,0 b.)

5. Řešení:

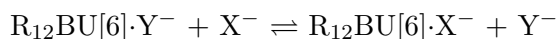


$$S_{\text{X}^-/\text{Y}^-} = \frac{K_{\text{X}^-}}{K_{\text{Y}^-}} \quad K_{\text{X}^-} = \frac{[\text{R}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{X}^-]}{[\text{R}_{12}\text{BU}[6]] \cdot [\text{X}^-]}$$

analogicky pro Y^-

$$S_{\text{X}^-/\text{Y}^-} = \frac{\frac{[\text{R}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{X}^-]}{[\text{R}_{12}\text{BU}[6]][\text{X}^-]}}{\frac{[\text{R}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{Y}^-]}{[\text{R}_{12}\text{BU}[6]][\text{Y}^-]}} = \frac{\frac{[\text{R}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{X}^-]}{[\text{X}^-]}}{\frac{[\text{R}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{Y}^-]}{[\text{Y}^-]}} = \frac{[\text{R}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{X}^-][\text{Y}^-]}{[\text{R}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{Y}^-][\text{X}^-]}$$

Stejný výsledek dostaneme i jako rovnovážnou konstantu rovnice:



(Rovnice se by se měla skutečně psát v tomto směru, v zadání je chyba, když je to psáno opačně, protože selektivita silněji vázaného aniontu proti slaběji vázanému aniontu odpovídá reakci vytěsnění slaběji vázaného aniontu z bambusurilu, proto je větší než jedna.)

(1,0 b.)

6. V úkolu 6 byla chyba v zadání. Koncentrace komplexů $i\text{Pr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{BF}_4^-$ a $i\text{Pr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{Cl}^-$ nebyly totiž v poměru 72:28, ale 28:72.

Přepíšeme si vztah pro selektivitu pro náš případ:

$$S_{\text{BF}_4^-/\text{Cl}^-} = \frac{[i\text{Pr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{BF}_4^-][\text{Cl}^-]}{[i\text{Pr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{Cl}^-][\text{BF}_4^-]}$$

Nejprve je třeba vyjádřit rovnovážné koncentrace ve vztahu.

Poměr komplexů známe z NMR spektra:

$$\frac{[\text{iPr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{BF}_4^-]}{[\text{iPr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{Cl}^-]} = \frac{28}{72}$$

Rovnovážné koncentrace volných aniontů vyjádříme jako rozdíl analytické (celkové) koncentrace a rovnovážné koncentrace komplexu s daným aniontem, protože část aniontů už není ve směsi přítomna jako volný anion, ale je navázána v bambusurilu:

$$[\text{Cl}^-] = c_{\text{Cl}^-} - [\text{iPr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{Cl}^-]$$

$$[\text{BF}_4^-] = c_{\text{BF}_4^-} - [\text{iPr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{BF}_4^-]$$

Předpokládáme, že veškerý bambusuril přítomný v roztoku se vyskytuje ve formě komplexu s některým z aniontů. Proto analytická koncentrace bambusurilu bude rovna součtu rovnovážných koncentrací obou komplexů. Díky tomu, že známe poměr jednotlivých komplexů (navíc přepočítaný tak, aby součet dával 1, resp. 100 %), můžeme si snadno vyjádřit rovnovážné koncentrace komplexů jako násobky analytické koncentrace bambusurilu:

$$[\text{iPr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{Cl}^-] = 0,72 c_{\text{BU}}$$

$$[\text{iPr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{BF}_4^-] = 0,28 c_{\text{BU}}$$

Po dosazení do vztahu pro selektivitu dostáváme:

$$S_{\text{BF}_4^-/\text{Cl}^-} = \frac{[\text{iPr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{BF}_4^-]}{[\text{iPr}_{12}\text{BU}[6] \cdot \text{Cl}^-]} \cdot \frac{c_{\text{Cl}^-} - 0,72 c_{\text{BU}}}{c_{\text{BF}_4^-} - 0,28 c_{\text{BU}}} = \frac{28}{72} \cdot \frac{10 - 0,72 \cdot 5,0}{1,5 - 0,28 \cdot 5,0} = 25$$

Selektivita isopropylovaného bambusurilu k tetrafluoroboritanovému aniontu vzhledem ke chloridovému aniontu je 25.

(2,0 b.)

7. Řešení:

$$K_{\text{BF}_4^-} = S_{\text{BF}_4^-/\text{Cl}^-} K_{\text{Cl}^-}$$

$$K_{\text{BF}_4^-} = 24,89 \cdot 2,1 \times 10^4 \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3 = 5,2 \times 10^5 \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3$$

Asociační konstanta komplexu isopropylovaného bambusurilu a tetrafluoroboritanového aniontu je $5,23 \times 10^5 \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3$.

(1,0 b.)

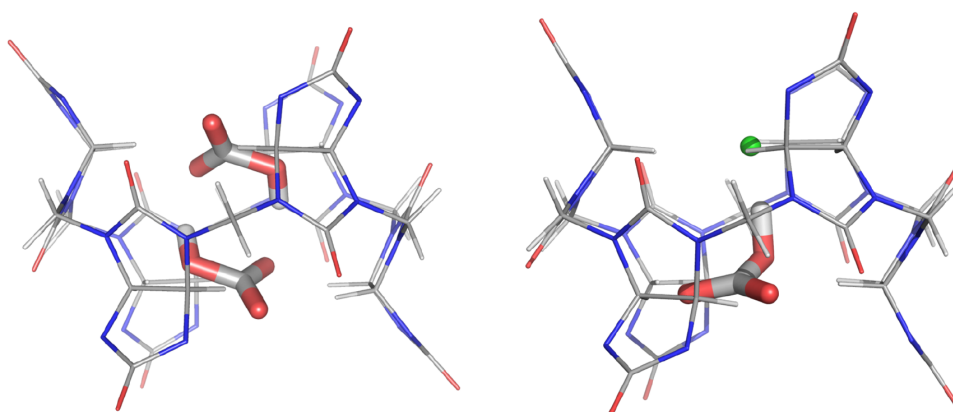
8. Názvosloví: hydrogensulfidový anion, sulfan (sirovodík), oxid dusnatý, oxid uhelnatý.

Například oxid uhelnatý je nebezpečný tím, že se váže na hemoglobin mnohem silněji než kyslík a znemožňuje tak transport kyslíku, což může způsobit až udušení. (Sulfan, oxid dusnatý i oxid uhelnatý rovněž zabraňují dýchání tím, že inhibují enzym cytochrom c oxidázu.)

Anionty, které by se mohlo hodit dopravovat do těla (bez ohledu na to, zda se můžou vázat v BU), jsou např. radioaktivní $^{99m}\text{TcO}_4^-$ (diagnostika), halogenidy (I^- pro funkci štítné žlázy), fosforečnany apod.

(1,5 b.)

9. Řešení:



Modely vytvořené semi-empirickými výpočty. Vázání dvou hydrogenuhličitanových aniontů (vlevo) a hydrogenuhličitanového aniontu společně s chloridovým aniontem (vpravo) v bambus[6]urilu. Obrázky jsou převzaty z *Valkenier, H.; Akrawi, O.; Jurček, P.; Sleziaková, K.; Lízal, T.; Bartík, K.; Šindelář, V.: Fluorinated Bambusurils as Highly Effective and Selective Transmembrane $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$ Antiporters. Chem, 2019, 5, 429–444, <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2018.11.008>*

Vodíkové můstky můžeme naznačit např. takto:



První struktura nápadně připomíná dimer organické kyseliny (skupina R namísto O^-). Byla uznávána i struktura s jedním vodíkovým můstkem mezi vodíkem OH skupiny a některým z kyslíků (mezi kyslíky je ve skutečnosti elektronová hustota rozložena rovnoměrně).

(1,5 b.)

C4 – Chemické technologie

Autor: Milan Říha (e-mail: milan.riha.23@gmail.com)

12 bodů

1. Kolik ropovodů zásobuje Českou republiku ropou? Jak se tento ropovod/tyto ropovody nazývají?

ČR zásobují 2 ropovody – **Družba** a **Ingolstadt**.

(0,5 b.)

2. Stručně popište rozdíl mezi destilací a rektifikací. Co je to teoretické patro?

Rektifikace je mnohonásobně destilace, prováděná v tzv. rektifikačních kolonách, které mohou být patrové či náplňové. Na rozdíl od destilace lze rektifikací oddělit i složky s blízkým bodem varu.

Teoretické patro popisuje účinnost rektifikační kolony (čím vyšší počet, tím vyšší účinnost). U patrových kolon je počet teoretických pater téměř shodný s počtem skutečných pater, u kolon náplňových lze výšku odpovídající teoretickému patru určit výpočtem či pokusem.

(1,5 b.)

3. Jaké nežádoucí efekty způsobují zmíněné soli při zpracování ropy (případně i při využívání ropných produktů)?

Ropa vytváří s roztoky solí ve vodě emulzi, která způsobuje několik nežádoucích vlivů – například způsobuje **korozí** zařízení, **usazuje** se v potrubích v pecích (čímž se **zhoršuje přístup tepla**), **deaktivuje** některé **katalyzátory**, které se používají při dalším zpracování ropy (ucpávají póry katalyzátoru) aj.

(1,0 b.)

4. Na základě termodynamiky varu vysvětlete, proč se pro látky s vysokým bodem varu využívá vakuová destilace. Jaký, v domácnosti běžně používaný, přístroj pracuje na opačném efektu (tedy zvýšení tlaku za účelem zvýšení bodu varu kapaliny)?

Var kapaliny je děj, který nastává při takové teplotě, při níž se vyrovná tlak nasycených par kapaliny s okolním tlakem. Kapaliny s nízkým bodem varu mají tlak nasycených par vysoký (a proto jen drobný ohřev může vést k varu, neboť tlak sytých par rychle dosáhne okolního tlaku). Naproti tomu látky s vysokým bodem varu mají tlak sytých par nízký a pro vyrovnání tlaku s okolním tlakem je potřeba volit intenzivnější zahřívání.

Nicméně, pokud se okolní tlak sníží, vyrovnání tlaku sytých par a okolního tlaku je snazší již při mírnějším ohřevu. Tohoto efektu se využívá při vakuové destilaci, při níž se sníží okolní tlak a látky potom vaří (a destilují) za mnohem nižších teplot.

Obráceného efektu se využívá v tzv. **Papinově hrnci**. Zahříváním kapaliny v téměř uzavřeném hrnci se rychle zvedne tlak, který vede k tomu, že kapalina v něm (nejčastěji voda) vře při vyšší teplotě (120–130 °C). Vzhledem k vyšší teplotě varu v Papinově hrnci je tak pokrm rychleji uvařen.

(2,5 b.)

5. Jak se nazývá rovnice, která udává vztah mezi okolním tlakem a teplotou varu kapaliny? Napište integrovaný tvar této rovnice.

Jedná se o Clausius-Clapeyronovu rovnici.

$$\ln\left(\frac{p_1}{p_2}\right) = \frac{-\Delta H_{vap}}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

T_1 – teplota varu při tlaku p_1 , T_2 – teplota varu při tlaku p_2 , ΔH_{vap} – molární výparná entalpie, R – univerzální plynová konstanta.

(1,0 b.)

6. Vypočítejte při jaké teplotě by vřel těžký olej za atmosférického tlaku, pokud víte, že při vakuové destilaci (tlaku 5 kPa) vřel při teplotě 350 °C a jeho molární výparná entalpie činí $\Delta H_{vap} = 43\,745 \text{ J mol}^{-1}$.

$$T_1 = 350 \text{ °C} = 623,15 \text{ K}, p_1 = 5000 \text{ Pa}$$

$$T_2 = ?, p_2 = 101\,325 \text{ Pa}$$

$$\Delta H_{vap} = 43\,745 \text{ J mol}^{-1}, R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

Vyjádřením T_2 z Clausius-Clapeyronovy rovnice získáváme:

$$T_2 = \frac{T_1 \cdot \Delta H_{vap}}{\Delta H_{vap} + T_1 \cdot R \cdot \ln(p_1/p_2)}$$

A následným dosazením:

$$T_2 = \frac{623,15 \text{ K} \cdot 43\,745 \text{ J mol}^{-1}}{43\,745 \text{ J mol}^{-1} + 623,15 \text{ K} \cdot 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \cdot \ln(5\,000 \text{ Pa}/101\,325 \text{ Pa})}$$

$$T_2 = 968,16 \text{ K} = \mathbf{695 \text{ °C}}$$

(3,0 b.)

7. Která frakce atmosférické či vakuové destilace se dále využívá pro výrobu motorové nafty? Co znamená pojem oktanové číslo a jak se nazývá obdobný parametr pro hodnocení kvality nafty?

Nafta se získává z frakce atmosférické destilace, jejíž teplota varu odpovídá 150–370 °C. Této teplotě odpovídá petrolejová frakce a tzv. **plynový olej**. Nafta se vyrábí převážně z plynového oleje, avšak i **kombinací plynového oleje a petrolejové frakce**.

Oktanové číslo je parametr paliv pro zážehové spalovací motory. Vyjadřuje odolnost paliva ve směsi se vzduchem proti samozápalu. Vyjadřuje se jako objemový zlomek 2,2,4-trimethylpentanu (isooktanu) ve směsi s *n*-heptanem – tzn. oktanové číslo (např. 95) znamená, že palivo je stejně odolné proti samozápalu jako směs 95 % (obj.) isooktanu a 5 % heptanu.

Podobný parametr pro hodnocení nafty je **cetanové číslo**. Vyjadřuje stejnou vlastnost jako oktanové číslo (ale u vznětových motorů) a udává se jako objemový zlomek hexadekanu (cetanu) ve směsi s 1-methylnaftalenem.

(1,5 b.)

8. Co je to visbreaking a mezi který typ krakování patří?

Visbreaking patří mezi termické (avšak jen mírné termické) krakování. Při visbreakingu dochází ke štěpení některých látek, přičemž toto štěpení způsobí pokles viskozity (čímž se mohou například zlepšit vlastnosti některých olejů). Název visbreaking je složenina slov viscosity-breaking, tedy „rozbití/lámání/zmírnění viskozity“.

(1,0 b.)