

Masarykova univerzita

Přírodovědecká fakulta



# Vzdělávací ikurz pro budoucí chemiky

Zadání 1. série

11. ročník (2020/2021)

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

Recenze úloh:

Marie Grunová (S1), Ana Maria Miralles Marco (C1), Hugo Semrád (A1), Jan Sokolov (S2) a Lukáš Žídek (B1)

© 2020 Tomáš Fiala, Marie Grunová, Simona Rozárka Jílková, Lenka Karpíšková, Jana Lapešová a Petra Pikulová.

© 2020 Masarykova univerzita

## Úvodník

Milé ViBuŠnice, milí ViBuŠníci,

vstupujeme do nové dekády ViBuChu. Tento školní rok bude zřejmě plný změn a nejistot. Rozhodně ale můžete počítat s pravidelnou zásobou chemické zábavy, kterou pro Vás jako každý rok zajišťuje ViBuCh ☺.

V první sérii začínáme krátkou úvodní úlohou, kde pomůžete vodě proklepnout si diamanta předtím, než mu dá své číslo. V dlouhé úvodní úloze se s pandou Fandou a jeho novou kamarádkou ze zoo zaměříte na bambusurily. V tématických úlohách se nejdříve seznámíte s jedním sympatickým neandrtálcem, který má zálibu ve fyzikální chemii. Dále se Vám představí nejrozšířenější bílkovina v lidském těle, kolagen. A nakonec se podíváte pořádně zblízka (možná víc, než byste chtěli) na potraviny, které běžně jíte.

Svá řešení nahrávejte do Odevzdávnice na stránkách ViBuChu<sup>1</sup> do 15. 11. 2020. Vzhledem k momentální nejisté situaci zatím nevíme, jestli a v jaké podobě budeme pořádat podzimní soustředění, které obvykle probíhá v říjnu nebo listopadu. Sledujte proto bedlivě naše webové stránky a facebook<sup>2</sup>.

Čím více řešitelů, tím veselejší ViBuCh, proto nezapomeňte o svém oblíbeném semináři říct i svým přírodovědně naladěným kamarádům. Přejeme při řešení spoustu zábavy a nového chemického poznání ☺.

Za orgtým ViBuChu

Peťa a Maru.

---

<sup>1</sup><http://vibuch.math.muni.cz/profil/submit>

<sup>2</sup><https://www.facebook.com/vibuch>

**S1 – Čas na CAS (první úvodní úloha)**

Autorka: Lenka Karpíšková (e-mail: lenula.kar@gmail.com)

3 body

Registrační číslo CAS (Chemical Abstracts Service) je unikátní číselný kód, který je přiřazen k chemickým sloučeninám, polymerům, některým definovaným směsím látek, slitinám nebo sekvencím DNA. Dle registračního čísla CAS lze látky identifikovat a vyhledávat ve většině databází a u prodejců. V současné době databáze CAS obsahuje 166 milionů látek, směsí a slitin, 66 milionů sekvencí proteinů nebo DNA a každý den se rozšiřuje o zhruba 15 tisíc položek.

Registrační číslo CAS se skládá ze tří částí oddělených pomlčkami. První část tvoří 2 až 7 číslic, druhou dvě číslice a třetí představuje kontrolní číslo, například registrační číslo CAS amoniaku je 7664-41-7. Číselný kód je tedy připraven pro 1 miliardu látek, což by mělo vydržet podle současných příbytků asi dalších 140 let.



**Úkol 1:** Napište dvě výhody, které představuje používání registračního čísla CAS místo chemických názvů.

Pro vyhledání registračních čísel CAS vám dost dobře poslouží Google, občas je vhodné si vypomocet angličtinou (a vyhledat CAS number).

**Úkol 2:** Pomozte diamantovi pozvat vodu na rande a najděte mu její CAS číslo. Najděte také CAS číslo diamantu, aby si o něm mohla voda najít informace, než nabídku přijme.

Další možností, jak získat registrační číslo CAS, nebo naopak pomocí něj vyhledat informace, představují různé databáze. V České republice je jedna z největších chemických databází Eurochem (<https://www.eurochem.cz/>), kde můžete najít informace zejména o klasifikaci a značení chemických látek.

**Úkol 3:** Látka s registračním číslem CAS 110-86-1 je běžně využívaným rozpouštědlem v laboratoři. Je dle klasifikace této látky vhodné pracovat s ní mimo digestoř? Proč?

## S2 – Fanda a transport aniontů (druhá úvodní úloha)

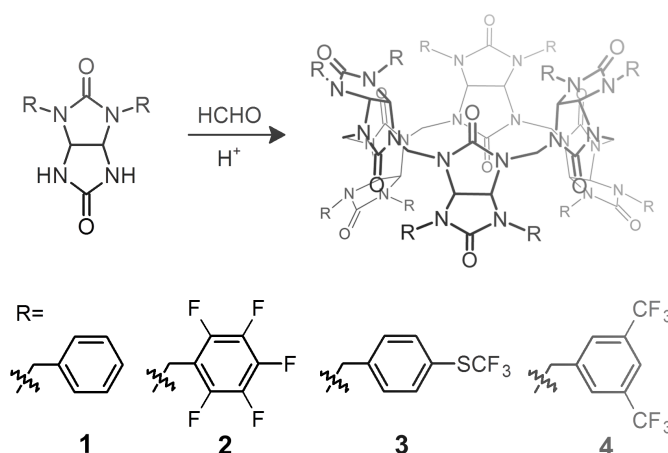
Autor: Jana Lapešová (e-mail: 474482@mail.muni.cz)

8 bodů

„Pomóóó! Já chci domů...“ ozvalo se už po několikáté v novém výběhu v schönbrunnské zoo. Fanda nemohl usnout a už mu pomalu docházela trpělivost, nakonec zvedl svůj chlupatý pandí zadek z postele. „Co se to tady děje? Hele, nevím jak ty, ale já mám v plánu ráno nasadit makrocyklizaci bambusurilu s parádními fluorovanými skupinami. Tak bych se na to rád vyspal!“ Kvílení ustalo a za mřížemi se objevil malý čumáček a dvě zvědavá očka: „Bambus-cože?“

A tak se Fanda usadil, rozloučil se s možností, že se dneska vyspí, a spustil o bambusurilech. Naproti němu seděla droboučká samička hlodouna čínského (Chinese Bamboo Rat) a poslouchala.

Podívej, v téhle vialce mám glykoluril, jeho strukturní vzorec by vypadal nějak takhle (začal čmárat bambusovou tyčkou na zem vzorec glykolurilu, který se chystal zítra ráno použít). Když jich vezmu šest a spojím je dokolečka, vznikne něco takového... To už v tlapce držel odborný článek<sup>3</sup>, který předtím odložil, když si myslel, že jde spát, a ukazoval hlodounce úvodní obrázek (obrázek 1).



Obr. 1: Schéma přípravy bambus[6]urilu<sup>1</sup>

Je to makrocyklus, který vypadá jako článek bambusu, a proto mu začali říkat bambus[6]uril. V místech, kde je napsáno „R“, se může navázat nějaká zajímavá skupina, právě držím v tlapce odborný článek, kde na bambus[6]urily navázali tyhle 4 skupiny.

A díky tomu, že do kavity neboli dutiny bambus[6]urilu směřuje 12 vodíků, se tam může vázat anion.

**Úkol 1:** Zamyslete se nad tím, jak je možné, že bambus[6]uril váže anionty:

- Jakou vlastnost mají vodíky v kavitě bambus[6]urilu?
- Jak se jmenuje vazba, která mezi vodíkem a aniontem v kavitě bambus[6]urilu vzniká?
- Do jaké skupiny vazeb patří?

<sup>3</sup>Valkenier, H.; Akrawi, O.; Jurček, P.; Sleziačková, K.; Lízal, T.; Bartik, K.; Šindelář, V. Fluorinated Bambusurils as Highly Effective and Selective Transmembrane Cl<sup>-</sup>/HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> Antiporters. *Chem* **2019**, *5* (2), 429–444. <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2018.11.008>.

Tyhle konkrétní bambus[6]urily byly navíc použity k transportu aniontů přes buněčnou membránu. Fluorované zbytky zvyšují nejen afinitu bambus[6]urilu k aniontům, ale také jejich lipofilitu.

**Úkol 2:** Co to znamená, že jsou tyto bambus[6]urily lipofilní? Budou se lépe rozpouštět ve vodě, nebo v organických rozpouštědlech?

K transportu aniontů přes membránu slouží obvykle membránové bílkoviny. Kvůli onemocněním, jako je cystická fibróza, kterou způsobuje nefunkční kanál pro transport chloridových aniontů, se však chemici snaží připravit umělé sloučeniny, které by je dokázaly nahradit.

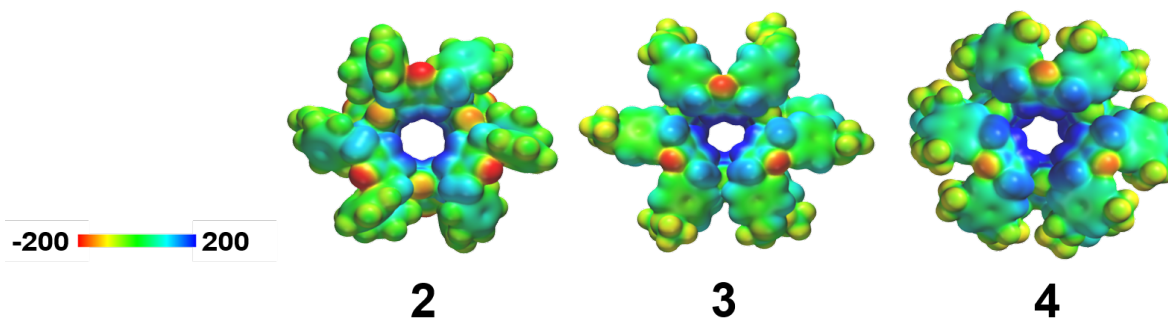
Důležitým aniontem, který je třeba dopravovat přes membránu, je i hydrogenuhličitanový anion. V jedné organele vzniká velké množství oxidu uhličitého, který se musí z buňky nějak dostat ven. Jedna z možností je antiport chloridového a hydrogenuhličitanového aniontu, což znamená, že chloridový anion na jedné straně membrány se vymění za hydrogenuhličitanový anion na druhé straně. Pokud antiport  $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$  nefunguje v červených krvinkách, jak má, může to způsobit celou řadu potíží od anémie až po hluchotu.

**Úkol 3:** Jak se nazývá proces, při kterém vzniká energie a uvolňuje se oxid uhličitý? Ve které organelle probíhá?

**Úkol 4:** Zamyslete se nad tím, k čemu dalšímu by se dal v organismu využít hydrogenuhličitan. Jakou veličinu lze upravovat uvolňováním hydrogenuhličitanu?

K tomu, aby se nějaká molekula dala použít pro transport konkrétního páru aniontů, je potřeba, aby byla dostatečně selektivní, v ideálním případě by měla fungovat jenom pro ten daný pár. Ve fyziologickém prostředí se ale vyskytují i jiné anionty – např.  $\text{NO}_3^-$ , proto je potřeba se ujistit, že vedle antiportu  $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$  nebude probíhat současně i antiport  $\text{Cl}^-/\text{NO}_3^-$ . To souvisí i s tím, jak silně se anionty v bambus[6]urilu vážou. K porovnání afinity bambusurilů vůči aniontům nám slouží veličina asociační konstanta. Čím je větší, tím lépe se váže anion do kavity bambus[6]urilu. Selektivita bambus[6]urilů pro antiport  $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$  vedle  $\text{Cl}^-/\text{NO}_3^-$  spočívá jednak v tom, že dusičnanový anion se váže v bambus[6]urilu mnohem silněji, a proto není možné, aby ho chlorid v kavitě nahradil, a také v tom, že chloridový a hydrogenuhličitanový anion je možné díky vzájemným interakcím navázat současně.

Tyhle barevné obrázky (obrázek 2) jsou mapy elektrostatického potenciálu. Modrá barva značí místa s částečně kladným nábojem, červená naopak záporným. Hezky je na nich vidět, do kterého bambus[6]urilu bude nejsnadnější navázat anion.



Obr. 2: Mapy elektrostatického potenciálu pro bambus[6]urily 2–4<sup>1</sup>

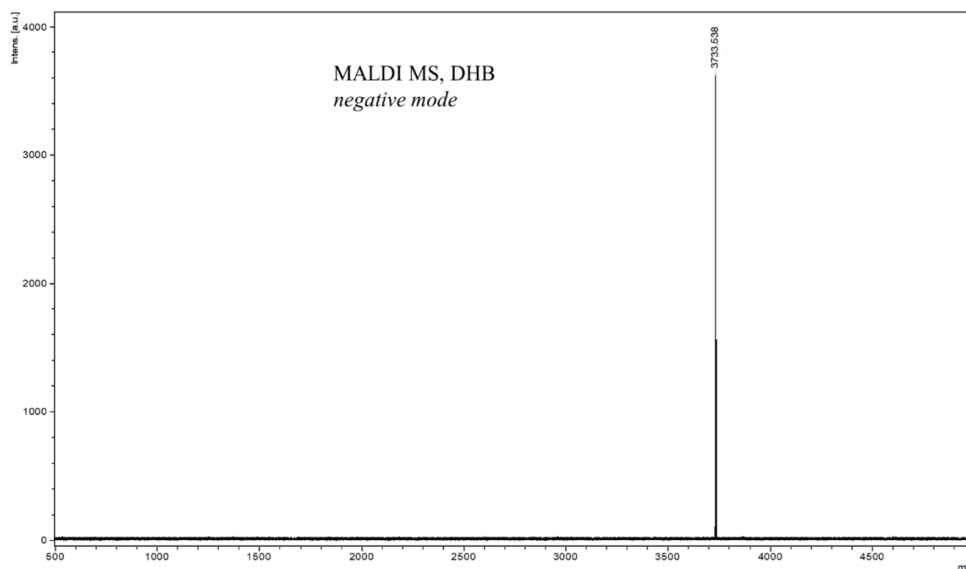
**Úkol 5:** Přiřaďte k bambus[6]urilům 2–4 (obrázek 2) řádky A–C v tabulce 1. Podle čeho jste to poznali?

**Tab. 1:** Asociační konstanty naměřené v acetonitrilu při 30 °C<sup>1</sup>

Bambus[6]uril	$K_a(\text{NO}_3^-)/$ (mol <sup>-1</sup> dm <sup>3</sup> )	$K_a(\text{Cl}^-)/$ (mol <sup>-1</sup> dm <sup>3</sup> )	$K_a(\text{HCO}_3^-)/$ (mol <sup>-1</sup> dm <sup>3</sup> )
A	$1 \times 10^{10}$	$2 \times 10^9$	$4 \times 10^8$
B	$1 \times 10^9$	$9 \times 10^7$	$1 \times 10^7$
C	$5 \times 10^{11}$	$6 \times 10^{10}$	$2 \times 10^9$

*Zatímco se Fanda rozplýval nad mapami elektrostatického potenciálu jeho nová sousedka se schoulila do klubíčka a usnula. Fanda si nebyl jistý, jestli ji jeho výklad zaujal, hlodounce se ale zdálo o kuličkách, které probíhaly přes bambusové články sem a tam, zítra se na ty bambusové kanálky bude muset znovu zeptat.*

**Úkol 6:** Druhý den připravil Fanda jeden ze zmíněných bambus[6]urilů. Po izolaci produktu poslal svůj vzorek na hmotnostní analýzu a získal následující spektrum (obrázek 3).



**Obr. 3:** Hmotnostní spektrum Fandova vzorku, negativní mód<sup>1</sup>

Pík, který vidíme ve spektru, má hodnotu 3733,538 ( $x$ -ová souřadnice přibližně odpovídá molární hmotnosti). Určete zbytek  $R$  (číslo 1–4 na obrázku 1), který je navázán na bambus[6]urilu, jehož komplexu s hydrogensíranovým aniontem odpovídá tato molární hmotnost. Popište Fandovi způsob, jakým jste na to přišli.

**Úkol 7:** Uveďte vzorec glykolurilu, který Fanda nakreslil hlodounce na začátku svého vyprávění. Vyjděte z obecného vzorce glykolurilu s  $R$  skupinami na obrázku 1 a nakreslete přímo do této struktury skupiny, které jste vyluštili z hmotnostního spektra v úkolu 6.

*Blíže se s Fandou i problematikou bambusurilů můžete seznámit ve starších úlohách ViBuChu (9. ročník, téma B – Bambusurily), které naleznete i s řešením v archivu: <http://vibuch.math.muni.cz/clanek?id=12>. Užitečné mohou být zejména úlohy B1 a B3.*

## A1 – Od páry k ledu

Autorka: Lenka Karpíšková (e-mail: lenula.kar@gmail.com)

14 bodů

Zdravím všechny řešitele, rád bych se vám představil! Jmenuji se Adam a jsem zamilovaný do fyzikální chemie (mojí ženě to ale radši neříkejte). Jsem trochu starší než vy, protože pocházím z pleistocénu, tedy doby, kdy jsme ještě žili my, neandrtálci, ale snad si i tak budeme rozumět. Přestože jsem na svou dobu velmi vyspělý<sup>4</sup> a o chemii, fyzice a přírodě toho vím hromady, potřeboval bych s některými věcmi poradit. Proto vás prosím, abyste mi pomohli s některými myšlenkami a výpočty (váženě, to, co vás čeká, se bude počítat lépe na kalkulačce než mně na prstech). Dobrá zpráva je, že jsem vám pro každou sérii vytvořil Vzorečkovník, který najdete ve studijních materiálech k úloze.

Bohužel jako neandrtálec mám omezený výběr chemikálií ke zkoumání, proto jsem zasvětil svoji vědeckou kariéru nejvíc fascinující látce ze všech – vodě. Nemá barvu, chuť, ani vůni, přesto se nachází v mnoha podobách. Kapalina, pára, led, sníh, kroupy, hotový fyzikálněchemický chameleon! Mně osobně přijde nejkrásnější, když ji zahřejeme nad ohněm a pozorujeme vodní páru v podobě mlhy. Někteří z tlupy si myslí, že jsou to jednotlivé bílé molekuly vody, které si můžeme takto krásně prohlédnout, ale to není vůbec pravda.

**Úkol 1:** Neandrtálci z tlupy opravdu nemají pravdu, když tvrdí, že mlha jsou jednotlivé bílé molekuly vody. Z jakých částic, které můžeme pozorovat vlastním okem, se skládá mlha nad vařící vodou?

Plynné molekuly se stále pohybují a vráží do sebe a okolí, ostatně to, jak pohybující se molekuly naráží, je původem síly, jejímž vydělením plochou dostáváme tlak. Střední rychlost molekul  $\bar{v}$  (neboli pravděpodobnostně vážený průměr všech možných rychlostí molekul) závisí na teplotě  $T$  a hmotnosti  $m$  vztahem (1), kde znaménko  $\propto$  značí přímou úměru. Všimněte si, že čím vyšší je teplota, tím rychleji se molekuly pohybují, a čím jsou těžší, tím pomaleji.

$$\bar{v} \propto \sqrt{\frac{T}{m}} \quad (1)$$

**Úkol 2:** Jak se změní střední rychlost molekul vody, pokud se teplota zvýší čtyřikrát?

Rád bych zjistil, o kolik je molekula vody rychlejší než moje nejoblíbenější zvíře, mamut.

**Úkol 3:** Kolikanásobně vyšší střední rychlostí se pohybují molekuly vody při teplotě 15 °C oproti Adamově večeři, která před ním utíká rychlostí 30 km h<sup>-1</sup>? Pro výpočet využijte vzoreček 1 ve Vzorečkovníku 1. Nezapomeňte dosazovat ve správných základních jednotkách (což jsou kg pro hmotnost a K pro teplotu).

**Úkol 4:** Kdyby byl mamut plynná molekula, na jakou minimální teplotu ve °C byste ho museli zahřát, aby se svou rychlostí pohybu vyrovnal standardnímu nemolekulárnímu mamutovi (tedy

<sup>4</sup>Pokud byste měli někdy pocit, že Adam příliš předčil svou dobu, je tomu opravdu tak. Bohužel tehdy ještě neexistovalo písmo a svoje poznatky nemohl zapsat, což je velká škoda, protože by ušetřil vědcům o 120 tisíc let později spoustu práce.



se pohyboval střední rychlostí  $30 \text{ km h}^{-1}$ )? Uvažujte mohutného samce mamuta srstnatého, který váží 6 tun. Taktéž použijte vzoreček 1.

Mimochodem, kdybyste chtěli výborný recept na mamuta s koprovou omáčkou, poptám se své ženy. Každopádně střední rychlost ve skutečnosti nic neříká o tom, jak rychle se molekula pohybuje, vše je dáno pravděpodobností. Molekuly plynu se pohybují různými rychlostmi a při vzájemných srážkách si vyměňují energii, čímž dochází ke změnám jejich rychlosti. Maxwelllovo-Boltzmannovo rozdělení ukazuje, jaké je statistické rozdělení rychlostí molekul při dané teplotě a hmotnosti. Prohlédněte si interaktivní animaci na této webové stránce:

[www.vascak.cz/data/android/physicsatschool/template.php?f=mf\\_rozdeleni\\_rychlosti&l=cz](http://www.vascak.cz/data/android/physicsatschool/template.php?f=mf_rozdeleni_rychlosti&l=cz).

Je zde zobrazeno Maxwelllovo-Boltzmannovo rozdělení pro molekuly o jednotné hmotnosti. Teplotu v kelvinech, pro kterou se má rozdělení zobrazit, volíte z nabídky.

**Úkol 5:** Jaká veličina může být v animaci zobrazena na ose  $y$ ?

**Úkol 6:** Tvar křivky Maxwelllova-Boltzmannova rozdělení se mění s teplotou. Kdy je pravděpodobnější, že budou mít dvě molekuly stejnou rychlost, při nižší, nebo vyšší teplotě?

Už jsem povídal o tom, jak vrážení molekul do sebe navzájem i okolí, je zdrojem toho, čemu my říkáme tlak. Vyvinul jsem si na demonstraci tlaku speciální pomůcku, říkám jí Teplotoměr 3000. Je to uzavřená nádoba, ve které je vodní pára. Tlak v této nádobě se mění s teplotou. Totiž čím víc budou molekuly vody narážet do stěn této nádoby, tím větší sílu budou vyvíjet na stále stejný povrch, a tak bude růst tlak. No a molekuly se pohybují tím rychleji, čím vyšší mají teplotu. S vyšší teplotou tlak roste. A pokud budu mít stále stejný objem nádoby, platí vztah:

$$p \propto T \text{ (konst. } V, n) \quad (2)$$

Vztah (2) se nazývá Charlesův zákon. Tato lineární závislost ovšem platí jen v případě, že uvažujeme ideální plyn. To je zjednodušená představa plynu, který se od reálného plynu liší tím, že nemá vnitřní tření a je dokonale stlačitelný.

**Úkol 7:** Kdy se bude reálný plyn nejvíce podobat ideálnímu plynu, při tlaku, který se blíží nekonečnu, nebo tlaku, který se blíží nule? Svoji odpověď zdůvodněte.

**Úkol 8:** Pro ideální plyn platí podmínka, že je dokonale stlačitelný, což znamená, že se může stlačovat donekonečna. Co se stane s reálným plynem, když se bude hodně stlačovat? (Poznámka pro pokročilejší: Uvažujte teplotu pod kritickým bodem.)

Pro ideální plyn platí stavová rovnice ideálního plynu (3), která byla odvozena z Charlesova zákona (2), Boyleova zákona a Avogadrova principu, které jsou uvedeny ve Vzorečkovníku 1 spolu s podrobným popisem stavové rovnice ideálního plynu.

$$pV = nRT \quad (3)$$

$R$  se nazývá plynová konstanta a její hodnota je přibližně  $8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ , tedy je to energie, kterou je třeba dodat jednomu molu molekul, aby se ohřál o jeden kelvin.

Rád bych celé tlupě svůj Teplotoměr 3000 ukázal a vysvětlil jim, jak funguje stavová rovnice ideálního plynu. Někteří z toho ale mají strach, protože už ty moje pokusy znají. . . Do dvoulitrové nádoby naliju 5 mililitrů vody a zahřiju ji na  $150 \text{ }^\circ\text{C}$ , takže se přemění na vodní páru, nádoba je dobře utěsněná, aby z ní nemohlo nic ven. Navrhoval jsem nádobu tak, aby vydržela tlak, který je roven třem atmosférám, pokud by v nádobě byl tlak vyšší, vybuchne. Jedna atmosféra je

tlak, který se rovná 101 325 Pa. Moje tlupa má strach zbytečně, že? Určitě nic nevybouchne, já mám na to čuch.

**Úkol 9:** Vypočítejte látkové množství vody v molech, které Adam nalil do nádoby. Počítejte s hustotou vody  $0,998\ 19\ \text{g cm}^{-3}$  (tato hustota platí pro jeskynní teplotu  $20\ ^\circ\text{C}$ ).

**Úkol 10:** Přepočítejte teplotu  $150\ ^\circ\text{C}$  na K (stačí uvést výsledek).

**Úkol 11:** Přepočítejte objem 2 litry na  $\text{m}^3$  (stačí uvést výsledek).

**Úkol 12:** Dosazením do stavové rovnice ideálního plynu vypočítejte tlak v pascalech, který bude mít vodní pára v nádobě po zahřátí.

Než v nádobě začne vřít voda, není v ní vzduchoprázdno ani vakuum, je v ní uzavřen nějaký vzduch. Dejme tomu, že před zahříváním je tlak tohoto vzduchu 1 atm, tedy 101 325 Pa. Pokud se v uzavřené nádobě zahřívá, zvyšuje se taktéž jeho tlak, vypočítal jsem, že při teplotě  $150\ ^\circ\text{C}$  tlak tohoto zahřátého vzduchu v mé dvoulitrové nádobě bude 146 kPa. Pro výpočet celkového tlaku pak poslouží Daltonův zákon, který říká, že celkový tlak se rovná součtu parciálních (neboli částečných) tlaků:

$$p_{\text{celkový v nádobě}} = p_{\text{zahřátý vzduch}} + p_{\text{vodní pára}} \quad (4)$$

**Úkol 13:** Jaký je tlak (v pascalech) v nádobě, tedy součet tlaku vodní páry a vzduchu?

**Úkol 14:** Vypočítejte tlak, který vydrží nádoba, v pascalech (stačí uvést výsledek). Vybouchne Adamův pokus (stačí uvést vybouchne/nevybouchne), čímž by byl strach jeho tlupy oprávněný?

Bohužel, ideální plyn existuje jen v ideálním světě, v reálném světě se potkáme jen s plyny reálnými, se kterými je to krapet složitější, protože nemůžeme využít některá zjednodušení. Existuje vícero modelů, které popisují reálné plyny, jedním z nich je van der Waalsova stavová rovnice ((4); taktéž ve Vzorečkovníku 1). Ta vychází ze stavové rovnice ideálního plynu, ale přidává navíc dva parametry,  $a$  a  $b$ , které reprezentují mezimolekulové přitažlivé a odpudivé síly. Tyto parametry jsou různé pro jednotlivé plyny, pro vodu je hodnota parametru  $a$  rovna  $5,536\ 4 \times 10^5\ \text{MPa cm}^6\ \text{mol}^{-2}$ , parametr  $b$  je roven  $30,5\ \text{cm}^3\ \text{mol}^{-1}$ . Bylo by zajímavé porovnat, jak moc nepřesné byly výpočty, které jste udělali pro můj pokus s Teplotoměrem 3000, když jste uvažovali ideální plyn.

$$p = \frac{nRT}{V - nb} - a \frac{n^2}{V^2} \quad (5)$$

**Úkol 15:** Vypočítejte tlak v pascalech, který jste počítali v úkolu 13, tentokrát ale s využitím van der Waalsovy stavové rovnice pro reálný plyn.

Relativní chyba  $\delta$  říká, jak se liší (v případě vztahu (5) o kolik procent se liší) naměřená nebo vypočtená hodnota oproti správné hodnotě, což je v našem případě hodnota pro reálný plyn.

$$\delta = \frac{|p_{\text{ideální plyn}} - p_{\text{reálný plyn}}|}{p_{\text{reálný plyn}}} \cdot 100\ \% \quad (6)$$

**Úkol 16:** Vypočítejte relativní chybu  $\delta$  svého výpočtu ideálního plynu oproti reálnému plynu v %, tak že vypočtené tlaky dosadíte do vztahu (5) v pascálech<sup>5</sup>.

**Úkol 17:** Na základě zjištěné relativní chyby  $\delta$  vlastními slovy zhodnoťte význam výpočtu z úkolu 16 pro reálný plyn v porovnání s výpočtem pro ideální plyn z úkolu 13, tedy jestli má smysl pro pokus s Teplotoměrem 3000 využití větší přesnosti výpočtem pro reálný plyn.

Děkuji vám za dnešní pomoc, teď už poběžím, mám svolanou tlupu na demonstraci Teplotoměru 3000. Popravdě, moc jsem vás s těmi výpočty neposlouchal, protože na svůj fyzikálně-chemický čuch nedám dopustit, ale příště vám dám vědět, jak se to tlupě líbilo.

---

<sup>5</sup>Kdyby se vám nepovedlo vypočítat některý z úkolů 12 nebo 15, použijte v úkolech 16 a 17 následující hodnoty:  $p_{\text{ideální plyn}} = 200\,000\text{ Pa}$ ,  $p_{\text{reálný plyn}} = 205\,000\text{ Pa}$ .

## B1 – Hrátky s kolagenem – Kterak kolagen DNA překonati chtěl

Autor: Tomáš Fiala (e-mail: [tfiala@ethz.ch](mailto:tfiala@ethz.ch))

13 bodů

Milí přátelé,

při řešení úloh o kolagenu se vám budou ježit všechny chlupy na těle a vlasy vám budou vstávat hrůzou. Moje úkoly se vám dostanou pod kůži, až přestanete jíst a budete vyzáblí až na kost!

...pokud jste neutekli a čtete dále, tak vězte, že to tak zlé nebude. ;-) Jen jsem demonstroval na bohaté nabídce českých úsluví, kolik se v nich nachází kolagenu. Ony totiž všechny výše zmíněné části těla, jakožto i šlachy, vazy, chrupavky a další tkáně strukturního typu, jsou bohaté na kolagen. Ten je tak vůbec nejrozšířenějším proteinem v lidském těle (tvorí až třetinu veškeré proteinové hmoty). V této sérii úloh si kolagen rozpitváme opravdu dopodrobna. Podíváme se nejen na jeho strukturu a funkci, ale zaměříme se také na snažení syntetických chemiků tento protein vyrobit a charakterizovat v laboratoři.

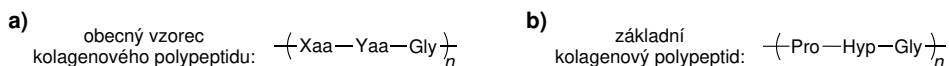
Jak vlastně takový kolagen vypadá? Jistě již něco málo víte o struktuře DNA – ta sestává ze dvou nukleotidových řetězců, které se kolem sebe stáčí do dvoušroubovice. Kolagen byl, zdá se, velmi soutěživá bílkovina a řekl si, že DNA ve skládání do šroubovic překoná. Přibral si tak ještě jeden řetězec a vytváří trojšroubovice (nutno podotknout, že peptidové, nikoliv nukleotidové). Tam to ale nekončí! Několik kolagenových trojšroubovic se nadále asociuje do fibril, a několik kolagenových fibril se poskládá ještě dál do kolagenových vláken – takové puzzle byste ručně skládat nechtěli. Jestli se vám z toho už teď točí hlava, tak nebojte. Půjdem zlehýnka a dnes se podíváme jen na první úroveň skládání kolagenu, tj. vznik kolagenové trojšroubovice. Přeji příjemné hrátky!

**Doporučená studijní literatura:** pro úspěšné zvládnutí první úlohy o kolagenu vám postačí základní znalosti o aminokyselinách a peptidech, které najdete v každé středoškolské učebnici chemie, trocha logického myšlení, a pro doplňující informace Google a Wikipedie. Kolagen má na Wikipedii celou vlastní stránku:

česky: <https://cs.wikipedia.org/wiki/Kolagen>

anglicky: <https://en.wikipedia.org/wiki/Collagen>

Základní strukturní jednotkou kolagenu je polypeptidový řetězec, který sestává z opakujících se skupin tří aminokyselin (Obr. 1a): aminokyseliny X (Xaa, z anglického **X** amino acid), aminokyseliny Y (Yaa) a glycinu (Gly). Zatímco glycin na místě třetí aminokyseliny je nutnost, aminokyseliny X a Y v první a druhé pozici mohou být různé. Přesto, zdaleka nejčastější Xaa je prolin (Pro) a zdaleka nejčastější Yaa je hydroxyprolin (Hyp). Polypeptidový řetězec s takto obsazenými pozicemi tedy nazvěme základní kolagenový polypeptid (Obr. 1b).



Obr. 1: a) Obecný vzorec kolagenového polypeptidu. b) Základní kolagenový polypeptid.

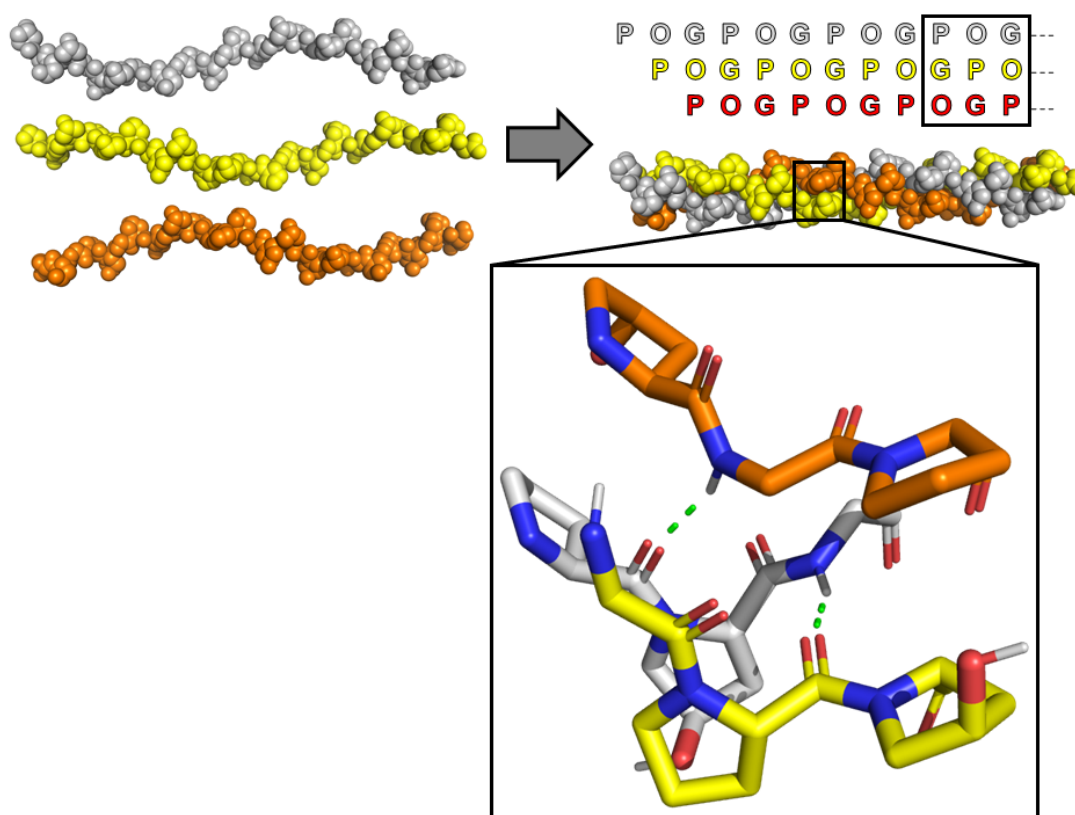
**Úkol 1:** Nakreslete strukturní vzorec základního kolagenového polypeptidu. Nezapomeňte vyznačit konfiguraci stereogenních center pomocí plných nebo čárkovaných klínkových vazeb. Uvažujte aminokyseliny v konfiguraci, ve které se převážně vyskytují v přírodě (tj. které rozeznává ribosom).

**Úkol 2:** V čem se liší aminokyselina prolin od všech ostatních aminokyselin kódovaných v DNA? Svou odpověď doprovodte vhodnými strukturami.

**Úkol 3:** Hydroxyprolin nepatří mezi kódované aminokyseliny, ale vzniká z prolinu v již hotových peptidech další reakcí (tzv. posttranslační modifikací). Do jaké kategorie reakcí patří přeměna prolinu na hydroxyprolin? Vyberte jednu z následujících možností:

cykloadice, eliminace, halogenace, makrocyklizace, oxidace, redukce

Tři kolagenové polypeptidy se skládají do trojšroubovice (Obr. 2). Jak je naznačeno diagramem s jednopísmennými zkratkami aminokyselin (Obr. 2 vpravo nahoře), jednotlivá polypeptidová vlákna jsou navzájem posunuta o právě jednu aminokyselinu a stabilizují vzniknuvší trojšroubovici supramolekulárními interakcemi mezi jednotlivými vlákny (Obr. 2 vpravo dole).



**Obr. 2:** Vznik kolagenové trojšroubovice. Jednopísmenné zkratky aminokyselin: P = prolin, O = hydroxyprolin, G = glycin. Barevný kód (struktura vpravo dole): uhlík = podle řetězce, dusík = modře, kyslík = červeně, vodík v OH nebo NH skupině = bíle, nekovalentní interakce = zeleně.

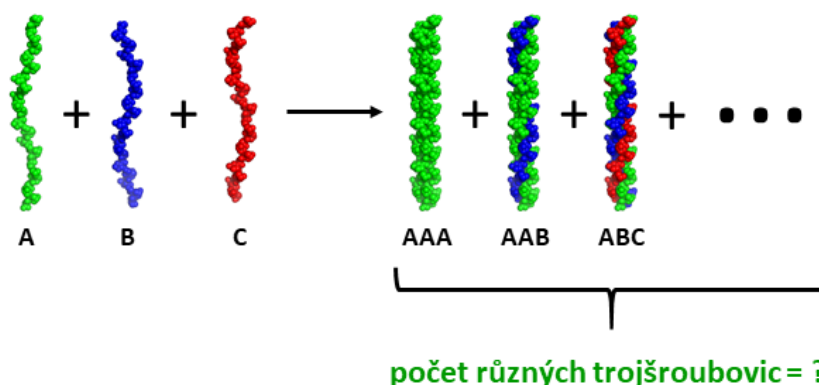
**Úkol 4:** Jak se nazývá nekovalentní interakce, která stabilizuje kolagenovou trojšroubovici (zeleně vytečkováno v Obr. 2 vpravo dole)? Nakreslete strukturní vzorce těch dvou aminokyselin, které tímto způsobem interagují a tuto nekovalentní vazbu vyznačte mezi příslušnými funkčními skupinami tečkovanou čarou.

**Úkol 5:** Vysvětlete, proč každá třetí aminokyselina v kolagenovém peptidu musí být glycin. Náповěda: v Obr. 2 vpravo dole si všimněte, že CH<sub>2</sub> skupina glycinu směřuje dovnitř trojšroubovice.

**Úkol 6:** Přírodní kolagenová trojšroubovice je pravotočivá. Určete, jaké trojšroubovice by vznikly z kolagenových řetězců obsahujících následující aminokyseliny:

- D-prolin, D-hydroxyprolin a glycin
- L-prolin, L-hydroxyprolin a glycin
- D-prolin, L-hydroxyprolin a glycin

Jak jsme si již řekli, kolagenové řetězce nemusí být všechny stejné a místo prolinu a hydroxyprolinu můžou polypeptidy obsahovat celou plejádu aminokyselin Xaa a Yaa. Řekněme, že v základním kolagenovém polypeptidu  $(POG)_n$  vyměníme první prolin za alanin, serin nebo lysin – a hned jsou to tři chemicky různá vlákna. A co se stane, když takováto tři vlákna smícháme do jednoho vzorku? – Začnou se skládat v různých kombinacích za vzniku roztočivých trojšroubovic. Pro lepší orientaci, místo přesných chemických vzorců nyní uvažujme, že máme ve vzorku tři odlišné kolagenové peptidy: zelený (A), modrý (B) a červený (C) (Obr. 3). V tomto vzorku se mohou například potkat tři peptidy A a vytvořit trojšroubovici AAA. Mohou se ale také potkat dvě vlákna A a jedno vlákno B, ze kterých může vzniknout trojšroubovice AAB. Ale počkat... a co ABA a BAA? No, a to jsme ještě neuvažovali střet jednoho kusu od každého vlákna... Učinný kolagenový guláš!



**Obr. 3:** Vznik kolagenových trojšroubovic ze tří různých polypeptidových řetězců.

**Úkol 7:** Jsou trojšroubovice AAB, ABA a BAA odlišné? Proč ano, nebo proč ne?

**Úkol 8:** Kolik chemicky různých trojšroubovic můžeme teoreticky nalézt ve vzorku podle Obr. 3? Uveďte celý výpočet.

*Tato úloha je financována z výzkumného a inovačního programu Evropské Unie Horizon 2020, Marie Skłodowska-Curie grantu pod číslem 891009.*



## C1 – Chemické látky a člověk – ingesční expozice

*Autorka: Simona Rozárka Jílková (e-mail: rozarka.jilkova@recetox.muni.cz)*

12 bodů

„Jez proto, abys žil. Nežij proto, abys jedl.“

*Hippokratés*

Paní Svobodová, vědkyně v oboru životního prostředí, před dvěma lety pomohla svému kamarádovi panu Novákovi na Vysočině objasnit „Syndrom nemocných budov“ (můžete se podívat na úlohu A4 v 9. ročníku, 4. sérii). Tentokrát si ale vědkyně paní Svobodová užívá zaslouženou dovolenou v podobném stavení na jižní Moravě. A když už si potřetí přidává z rautového stolu, zamyslí se nad tím, jaké chemické látky do sebe vpraví tím, že jí a pije. Co třeba tahle skvělá jablka ze zdejšího sadu?

**Úkol 1:** Vypište chemické látky, které jsou nebo mohou být obsaženy v jablkách. Pro utřídění myšlenek rozdělte chemické látky do skupin podle své volby.

Páni, to je ale dlouhatánský seznam. Na druhou stranu si paní Svobodová uvědomuje, že spousta vypsanych látek je v jablkách přirozeně.

**Úkol 2:** Zvýrazněte látky, které se v jablkách přirozeně nevyskytují a rozdělte je do dvou skupin: záměrně a nezáměrně se na jablkách vyskytujících.

Paní Svobodová se zamyslela. Dobře, tohle všechno tam může být. Ale jsme v moderním světě, v Evropě. Jak to celé funguje? Kontroluje někdo kvalitu potravin? A tak místo užívání si jablek a rautu začala zjišťovat informace.

Pro běžného českého uživatele je zřízen portál <https://www.bezpecnostpotravin.cz>, kde jsou mimo jiné uvedena varování před závadnými potravinami a produkty.

**Úkol 3:** Zjistěte, proč hlavní hygienička ČR dne 27. 7. 2020 varovala před konzumací jahod (Zn. Náš statek, EVEREST; hluboce zmrazené ovoce, hmotnost 1 kg; šarže 31. 8. 2021, 27. 2. 2022).

Krom varování pro české spotřebitele jsou zde přeložená varování z celoevropského Systému rychlého varování pro potraviny a krmiva (Rapid Alert System for Food and Feed, RASFF). Přeložené týdenní zprávy naleznete na: <https://www.bezpecnostpotravin.cz/kategorie/hlaseni-v-systemu-rasff.aspx>; a pro zájemce aktuální přehled RASFF na: <https://webgate.ec.europa.eu/-rasff-window/portal/?event=notificationsList&StartRow=1>.

**Úkol 4:** Podívejte se na hlášení za 34. týden v roce 2020. Vyjmenujte alespoň čtyři obecné důvody pro zakázání prodeje potravin. Uveďte jeden, který vás nejvíce zaujal.

Proč ale některé potraviny jsou zakázané kvůli detekovanému pesticidu? Vždyť přeci pesticidy jsou používány i na rostliny, takže by tam měly být, ne?

Je to z toho důvodu, že ne každý pesticid se může používat na všechny rostliny. Navíc byla stanovena hladina pesticidu, která není pro spotřebitele nebezpečná. Této hladině se říká mezní reziduální hodnota (Maximum Residue Level, MRL) a ta nesmí být v potravine přesazena. MRL pro jednotlivé pesticidy a potraviny naleznete v evropské databázi pro pesticidy: <https://ec.europa.eu/food/plant/pesticides/eu-pesticides-database/public/?event=pesticide.residue.selection&language=EN>.

**Úkol 5:** V Nizozemsku bylo ohlášeno vyloučení žlutých a zelených paprik z trhu kvůli koncentraci flonikamidu (<https://www.bezpecnostpotravin.cz/hlaseni-v-systemu-rasff-34-tyden-20-20.aspx>). Jaká je jeho MRL v paprikách a jaká byla hmotnostní frakce na zmíněných paprikách změřena? (Nápověda: Anglicky je flonikamid „flonicamid“.)

U snídaně se vědkyně paní Svobodová s chutí pustila do ovoce, zeleniny a do kávy. Páni, taková káva, to je asi obtížné vypěstovat. Někde četla, že na kávu se používá mnoho pesticidů. Kdo ví, kolik takových pesticidů tam bude. Na to se podívá v laboratoři.

Pro prvotní průzkum nakoupila paní vědkyně jednu zelenou, nepraženou, kávu, a pak kávu jak bio (bez použití pesticidů), tak z běžné produkce.

**Úkol 6:** Doplňte MRL do tabulky 1. Zakázali byste prodej nějakého produktu? Proč jsou naměřené hmotnostní frakce u pražených káv obdobné nehledě na používání pesticidů? (Nápověda: A proč u nepražené kávy jsou hladiny vyšší?)

**Tab. 1:** Naměřené hodnoty hmotnostní frakce pesticidů v kávě.

Pesticid	MRL / (mg/kg)		
	Zelená káva	Pražená káva	Pražená káva z biologického zemědělství
Lindan	0,015	0,001	0,001
Imidacloprid	1,2	0,05	0,05
Propiconazole	0,015	0,001	0,001
Chlorpyrifos	0,049	0,025	0,01
Fosetyl-Al	4,5	2,3	0,2

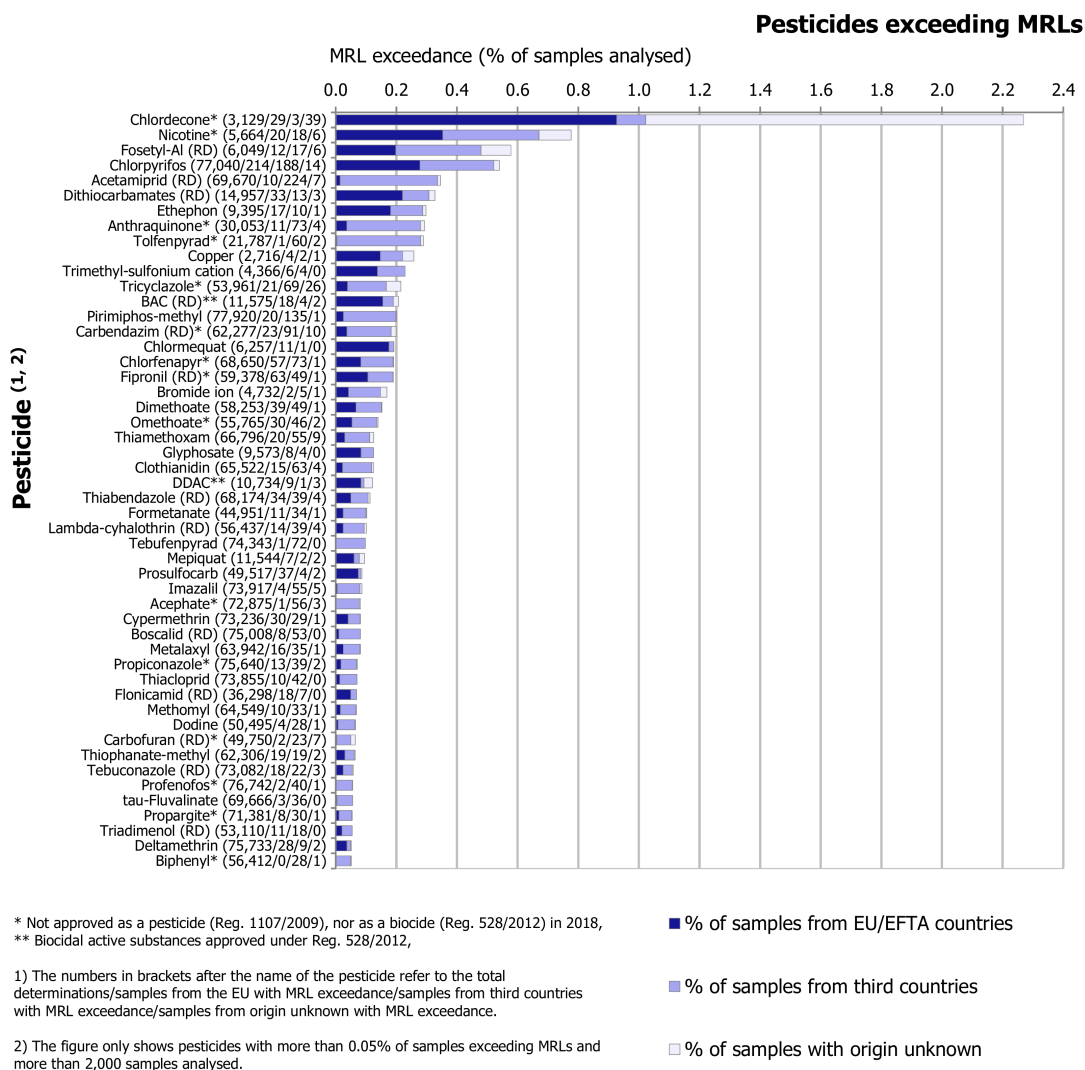
Paní Svobodová se uklidnila, že může vesele dál pít kávu a nemusí mít strach z pesticidů. Ale je káva to nejzásadnější, co by ji mělo zajímat? Možná by si měla udělat nějaký průzkum na potravinách, co opravdu jí.

**Úkol 7:** Zapisujte si jeden všední a jeden víkendový den vše, co jste snědli. Poznačte si i množství. Z uvedených surovin vyberte tři zástupce, které jste jedli v největším množství a jsou rostlinného původu (jeden zástupce pro tučné, jeden pro sacharidové a jeden pro vodnaté suroviny (např. mandle, rýže, okurka)).

Na který pesticid se ale zaměřit? Všechny pesticidy snadno neobsáhne, ale mohla by se zaměřit na nějaké významné. Třeba ty, které jsou nejčastějším důvodem pro zamítnutí potravin.

**Úkol 8:** Na příloženém grafu 1 je uveden počet případů, kdy dané pesticidy a další látky přesahovaly v potravinách mezní hodnoty. V grafu najdete dva pesticidy, které nejčastěji přesáhly MRL. Pro zajímavost si najdete MRL pro tyto dva pesticidy ve svých třech potravinách.





**Obr. 1:** Množství produktů s detekovanými hodnotami pesticidů a dalších látek vyšších než MRL<sup>6</sup>.

Paní Svobodová se dívá na svůj seznam jídla a pití. Dobře, možná by si občas tyto tři potraviny, které jí nejvíce, mohla koupit v bio kvalitě. Tam by tyto dva pesticidy být neměly, a tak sníží svoji expozici (a vy už teď můžete taky ☺). A s příjemným pocitem, že se dozvěděla něco nového, se začetla do dopisu od svého kamaráda. Hmm, Alfonso potřebuje pomoci a ona by se tak ráda podívala do Španělska. . .

*Querida amiga,*

*realmente necesito tu ayuda con los pesticidas en mis albaricoques. ¡Por favor, ven, disfruta de la bonita costa española y ayúdame!*

*Sinceramente, Alfonso*

### Detektivka na závěr inspirovaná skutečným případem (průběžný úkol, část 1):

Alfonso Rodriguez, španělský přítel paní Svobodové z dob studií, se rozhodl pověsit vědu na hřebíček a užívat si klidu sadů. Začal pěstovat meruňky, a protože byl letos skvělý rok

<sup>6</sup>The 2018 European Union report on pesticide residues in food, kapitola 4.2.3 (doi.org/10.2903/j.efsa.2020.6057)

na meruňky a měl velikou úrodu, rozhodl se meruňky prodávat ve velkém. A tak si objednal zprostředkovatele, který zajistí zabalení meruněk a dodání do obchodních řetězců. Vše vypadalo skvěle, nicméně, věda ho dostihla. Při náhodné kontrole bylo zjištěno, že dané meruňky obsahují velké množství pesticidu chlorpyrifos a byly staženy z prodeje. Alfonsovi to nejde do hlavy. Jak to je jen možné? Vždyť on tenhle pesticid vůbec, ale vůbec nepoužívá! A tak Alfonso kontaktoval svoji kamarádku, vědkyni paní Svobodovou, aby záhadu spolu rozlouskli.

Zkuste si práci vědeckého detektiva i vy a zjistěte, kde se daný chlorpyrifos na meruňkách vzal.

**Úkol 9:** Naměřená hodnota chlorpyrifosu na meruňkách byla 1 mg/kg. Zjistěte, jaká je mezní reziduální hodnota (MRL) pro meruňky.

**Úkol 10:** Nakreslete schéma cesty meruněk až na pult v obchodu. Vyznačte všechny možnosti, kde mohlo dojít k použití nebo kontaminaci meruněk chlorpyrifosem.

**Úkol 11:** Navrhněte plán vzorkování tak, abyste odhalili zdroj chlorpyrifosu na Alfonsových meruňkách. Náповěda: Ideálně vyznačte do obrázku z úkolu 10, kde a co byste vzorkovali – např. vzduch v Alfonsově kuchyni.

Dobrodružství Sovičky a Žeryka ve světě dihydrogenmonoxidu

