

Masarykova univerzita

Přírodovědecká fakulta



# Vzdělávací ikurz pro budoucí chemiky

Řešení úkolů 3. série

11. ročník (2020/2021)

## S5 – Valentýnská úloha (pátá úvodní úloha)

Autoři: Jiří Doseděl (e-mail: jirka.dosedel@email.cz)

4 body

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

1. Uznávána byla všechna barviva, která mohou obarvit papír danou barvou. Často se v řešeních objevoval karmín, který má červenou barvu, uváděli jste ale třeba i berlínskou modř, která by papír obarvila na modro.

(1,0 b.)

2. Za texty bylo udělováno 1,5–2,5 bodu podle originality, vtipnosti, náročnosti, množství zakomponované chemické tematiky, poetičnosti a funkčnosti.

(2,0 b. + 0,5 b. bonus)

3. Hodnocena byla věcná správnost a didaktičnost vysvětlení.

(1,0 b.)

Přikládáme několik obzvlášť povedených řešení úlohy 2 a 3.

*Jana Chaloupková*

„S – Sloučeniny síry na obloze tmavé,  
září mnohem méně, než tvé oči hravé.

O – Jsi pro mě více radostí,  
nežli kyslík nutností.

V – Jak vanad zpevňujíc ocel, ty tužíš náš vztah.  
A jistotu mi dáváš, že nehrozí nám krach.

Ir – I tvá fantazie je barevná jak soli iridia,  
Jsi zkrátka dokonalá, má nejmilejší milá.

C – Život z tebe více září,  
nežli uhlík ho vytváří.

K – Nechť náš vztah roste, bují, kvete dál a dál,  
jako ta kytka, kteréž jsem draslík přisypal.

Au – Tvé laskavé srdce ni ryzým zlatem nevyváží.  
Ať se snaží, jak se snaží, oni to nedokáží!!!“

Vysvětlení:

„S – Síra již od starověku byla složkou výbušnin a pyrotechniky, dnes v tomto směru používá spíše jen v zábavní pyrotechnice (např. v ohňostrojích).

O – Kyslík je nezbytný pro život většiny živých organismů na této planetě.

V – I malé množství vanadu způsobuje značný nárůst pevnosti oceli.

Ir – Mnoho solí iridia je silně zbarveno, i proto ho jeho objevitel pojmenoval podle Iris (*Ἴρις*), řecké bohyně duhy.

C – Uhlík je základem všech organických sloučenin, tedy i všeho živého.

K – Draslík zasahuje do celé řady metabolických procesů rostliny. Významná je jeho účast na fotosyntéze a dýchání, také řídí mnoho dalších procesů, např. hospodařen se sacharidy.

Au – Zlato je vzácný kov, který se napříč historií již od starověku používal jako platidlo. Vždy bylo považováno za velmi cenné. Dnes se pohybuje cena ryzího (čistého) zlata kolem 1250 Kč/g.“

*Filip Hůlek*

„I hope you are made of Carbon-14 isotope because I would like to date you.“

Vysvětlení:

„V angličtině má slovo date dva významy – jeden ve smyslu s někým chodit, druhý jako datovat. A jedna z metod, pomocí které se datují objekty je Radiokarbonová metoda datování (Radiocarbon dating), která využívá pro datování nuklid uhlíku C-14.“

*Kristian Sitár*

„Drahá Sovička Vibušnica,  
až mi nafukuje líca,  
keď zisťujem, že pri tebe nemôžem byť.  
Karanténa sa nás snaží oddeliť.  
Sme oddelení ako dve fázy,  
o chvíľu ma to na kolená zrazí.  
Chcem sa dostať späť do oddeľujúceho lievika,  
nech sa mi konečne za tebou nevzlyká.  
Si dôležitá ako žiarenie pri fotosyntéze,  
teším sa už na teba pri najbližšom zraze.  
Tvoje oči modravé videl by som rád,  
takú farbu nemá ani med'natý pentahydrát.  
Tvoje perie je jednou z nekonečných krás,  
je také jedinečné ako číslo CAS.  
Keď Ťa konečne po čase stretnem,  
jak fluór po elektróne sa vrhnem.  
Vrhnem sa a objímam, snáď už bez infekcií,  
ty si môj katalyzátor v srdcovej reakcii.  
Na teba, Sovička, nemajú žiadne ženy,  
si pre mňa nadčasová ako fullerény.  
Veľmi Ťa milujem a dal by som všetko,  
aby som dohodol s Tebou ďalšie stretko.  
Sovák“

Vysvětlení:

„Sme oddelení ako dve fázy“ – pri oddeľovacej metóde zvanej extrakcia sa oddeľujú dve fázy: extrakt a rafinát. Tieto fázy sa oddeľujú na základe rôznych hustôt.

„Chcem sa dostať späť do oddeľujúceho lievika“ – extrakcia prebieha v laboratórnom skle, ktoré sa nazýva oddeľovací lievik.

„Si dôležitá ako žiarenie pri fotosyntéze“ – fotosyntéza je biochemický proces založený na energii slnečného žiarenia. Je podmienkou priebehu svetelnej fázy pri fotosyntéze, pri ktorej je potrebné svetelné žiarenie s vlnovou dĺžkou 400–700 nm.

„Tvoje oči modravé videl by som rád, takú farbu nemá ani med'natý pentahydrát.“ – pen-

tahydrát síranu měďnatého alebo modrá skalica je v kryštalickom stave typický svojím modrým sfarbením.

„jedinečné ako číslo CAS“ – číslo CAS je jedinečný kód konkrétnej zlúčeniny, na základe ktorého možno jednoznačne identifikovať organické i anorganické molekuly, minerály či izotopy.

„jak fluór po elektróne sa vrhnem“ – fluór je prvok, ktorý sa snaží dosiahnuť elektrónovú konfiguráciu valenčnej vrstvy  $2s^2 2p^6$ , čo dosiahne prijatím elektrónu a vytvorením fluoridového aniónu  $F^-$ .

„ty si môj katalyzátor v srdcovej reakcii“ – katalyzátor (berieme pozitívny katalyzátor) je látka, ktorá urýchľuje priebeh chemických reakcií.

„si pre mňa nadčasová ako fullerény“ – fullerény sú jedna z alotropických modifikácií uhlíka. Fullerény disponujú veľmi zaujímavými fyzikálnymi vlastnosťami a považujú sa tak za najlepší materiál v oblasti nanotechnológie využiteľných zdrojov. Objav fullerénov je datovaný len na koniec minulého storočia, čo z nich robí veľmi nadčasové a výnimočné materiály na výrobu rôznych súčiastok, nanorúriek a podobne.

**S6 – Cogitat, ergo quantifies ... Myslí, tedy kvantuje... (šestá úvodní úloha)**

Autor: Tomáš Štefanov (e-mail: stefanot@vscht.cz)

12 bodů

Hodnoty konstant dosazených ve výpočtech:

$$h = 6,626\,070\,15 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$$

$$k_B = 1,380\,649 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$$

$$N_A = 6,022\,140\,76 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$m_e = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

1. Řešení:

- (a) Částice světla se jmenuje foton z řeckého slova phos (světlo). Toto pojmenování poprvé použil Gilbert Newton Lewis.

**(0,50 b.)**

(b)

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

pozor, ne  $E = h\nu$ , tohle je vztah mezi energií a frekvencí! **(0,50 b.)**

- (c) Vlnová délka záření je  $\lambda = 120 \text{ nm} = 1,20 \times 10^{-7} \text{ m}$ . Energie záření se potom vypočítá jako

$$E = \frac{hc}{1,20 \times 10^{-7} \text{ m}} = 1,655 \times 10^{-18} \text{ J} = 10,3 \text{ eV}$$

**(0,75 b.)**

2. Řešení:

- (a) Řekli jsme si, že vypařený sodík z pícky můžeme aproximovat na ideální plyn. V ideálním plynu má jedna částice energii danou vztahem:  $E = 3/2k_B T$ . V našem případě je  $T = 900 \text{ °C}$ . Energie jednoho atomu sodíku bude tedy:

$$E = \frac{3}{2}k_B (900 + 273,15) \text{ K} \approx 2,43 \times 10^{-20} \text{ J}$$

**(1,00 b.)**

- (b) Sodíkový atom má nějakou hybnost. Stejně i foton jako částice světla má hybnost, která je ale mnohem menší. Aby se tedy atom sodíku „zastavil“, musí se jeho hybnost rovnat celkové hybnosti fotonů. Hybnost atomu sodíku vypočítáme jako:

$$p_{Na} = \sqrt{2mE}$$

kde  $E$  je energie z předchozího úkolu a  $m$  je hmotnost jednoho sodíkového atomu:

$$m = \frac{M}{N_A} = \frac{22,9898 \times 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}}{N_A} = 3,8175 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

Jeho hybnost je potom  $p_{Na} = 4,3073 \times 10^{-23} \text{ kg m s}^{-1}$ . Hybnost jednoho fotonu o vlnové délce  $\lambda = 120 \text{ nm}$  vypočítáme jako:

$$p_f = \frac{h}{\lambda} = 5,52 \times 10^{-27} \text{ kg m s}^{-1}$$

Po dosazení do rovnice  $p_{Na} = Np_f$  dostaneme, že počet fotonů  $N \approx 7800$ . (1,00 b.)

3. Jako první si vypočítáme energii fotonu při  $\lambda = 656 \text{ nm}$ .

$$E = \frac{hc}{\lambda} = 3,028 \times 10^{-19} \text{ J} = 1,89 \text{ eV}$$

Nejefektivnější metoda bude tedy vypočítat si jednotlivé energetické hladiny atomu vodíku a pak se dívat, mezi kterými je rozdíl 1,89 eV. Pro  $n = 1$  se vypočítá  $E_1$  jako:

$$E_1 = Z^2 \frac{-13,59 \text{ eV}}{n^2} = 1^2 \frac{-13,59 \text{ eV}}{1^2} = -13,59 \text{ eV}$$

Analogicky se vypočítá  $E_n$  i pro další  $n$ :  $E_2 = -3,40 \text{ eV}$ ;  $E_3 = -1,51 \text{ eV}$ ;  $E_4 = -0,85 \text{ eV} \dots$

Jak je vidět, energie fotonu odpovídá přechodu z hladiny  $n = 3$  do  $n = 2$ , resp.  $E_3 - E_2 = -1,51 \text{ eV} - (-3,4 \text{ eV}) = 1,89 \text{ eV}$ .

(1,50 b.)

4. Řešení:

(a)  $E_k = h\nu - W$ ; případně  $1/2mv^2 = h\nu - W$ .

$E_k$  je kinetická energie vyražených elektronů,  $h$  je Planckova konstanta,  $\nu$  je frekvence dopadajícího záření a  $W$  je výstupní práce potřebná k vyrazení elektronu z kovu. Pokud je energie záření ( $h\nu$ ) menší než výstupní práce, elektrony se z kovu nevyrazí.

(1,00 b.)

(b) Energie dopadajícího záření je  $E = h\nu = E_6 - E_2 = -0,377 \text{ eV} - (-3,4 \text{ eV}) = 3,023 \text{ eV}$  (výpočet viz úkol 3). Po dosazení do rovnice dostaneme pro draslík:  $E_k = 3,023 \text{ eV} - 2,29 \text{ eV} = 0,733 \text{ eV}$ .

A pro hořčík:  $E_k = 3,023 \text{ eV} - 3,66 \text{ eV} = -0,637 \text{ eV}$

Protože kinetická energie může nabývat pouze kladné hodnoty (pouze kladné hodnoty mají fyzikální smysl), elektrony se budou uvolňovat pouze z draslíkové elektrody. Rychlost těchto elektronů vypočítáme pomocí klasického vztahu pro kinetickou energii. Kinetickou energii je třeba převést na J.

$$E_k = \frac{1}{2}m_e v^2 \quad \longrightarrow \quad v = \sqrt{\frac{2E_k}{m_e}} = 5,08 \times 10^5 \text{ m s}^{-1}$$

(1,00 b.)

5. Řešení:

- (a) Reakce vodíku s chlorem je radikálová reakce. Na její průběh musíme rozštěpit vazbu Cl-Cl na dva chlorové radikály. Toho dosáhneme tak, že na směs posvítíme světlem se stejnou energií, jakou má vazba mezi chlory. Energie vazby je  $242 \text{ kJ mol}^{-1}$ , což po přepočtu na jednu molekulu dává:

$$\frac{242000 \text{ kJ}}{N_A} = 4,019 \times 10^{-19} \text{ J, resp. } 2,508 \text{ eV}$$

Vlnová délka světla, které má stejnou energii, je:

$$\lambda = \frac{hc}{E} = 494 \text{ nm}$$

(1,00 b.)

- (b) Přes den bude reakce iniciovaná slunečním světlem a plyny budou spolu okamžitě reagovat na chlorovodík, zatímco přes noc se nestane nic, protože slunce nebude svítit.

(0,50 b.)

6. Řešení:

- (a) Molekula ethyleny obsahuje v konjugovaném systému jen dva atomy uhlíku a tedy dva  $\pi$  elektrony. Délka potenciálové jámy bude tedy:

$$L = 1,4 \cdot 2 \cdot 1,75 \cdot 2^{-0,37} = 3,792 \text{ \AA}$$

Orbital HOMO bude odpovídat hladině  $n = 1$  a LUMO hladině  $n = 2$ . Energetický přechod bude tedy mezi  $E_1$  a  $E_2$  a bude se rovnat rozdílu energií  $\Delta E$ :

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot (3,792 \times 10^{-10} \text{ m})^2} (2^2 - 1^2) = 1,257 \times 10^{-18} \text{ J}$$

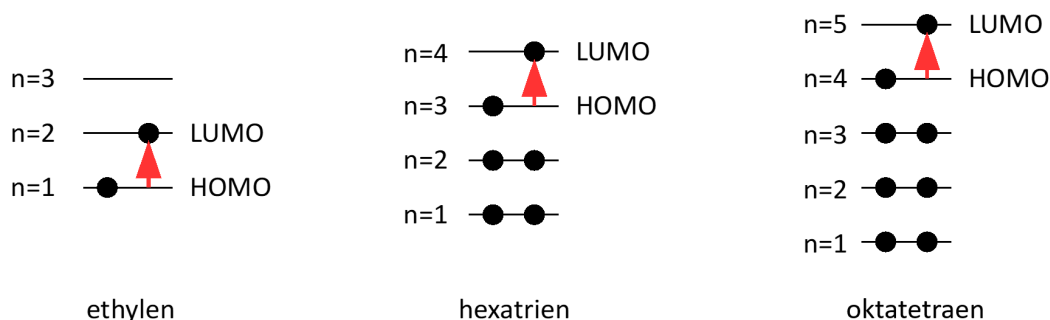
Energie fotonů bude  $1,257 \times 10^{-18} \text{ J}$ , což je  $7,85 \text{ eV}$ , resp.  $756,98 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Vlnová délka fotonů potom bude:

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 158 \text{ nm}$$

Obdobně vypočítáme hodnoty pro hexatrien, který bude mít  $n = 6$  a  $L = 7,575 \text{ \AA}$ . HOMO orbital bude na hladině  $n = 3$  a LUMO na  $n = 4$ .

$$\Delta E = E_4 - E_3 = 7,349 \times 10^{-19} \text{ J} = 4,59 \text{ eV} = 442,57 \text{ kJ mol}^{-1}. \lambda = 270 \text{ nm.}$$

Oktatetraen bude mít  $N = 8$  a  $L = 9,081 \text{ \AA}$ . HOMO orbital bude na hladině  $n = 4$  a LUMO na  $n = 5$ .  $\Delta E = E_5 - E_4 = 6,575 \times 10^{-19} \text{ J} = 4,10 \text{ eV} = 395,96 \text{ kJ mol}^{-1}$ .  $\lambda = 302 \text{ nm.}$



(3 × 0,75 b.)

- (b) Obdobně jako v předešlé úloze vypočítáme hodnoty pro  $\beta$ -karoten, který bude mít  $N = 22$  (i když má molekula uhlíků více, počítáme jen uhlíky přímo v konjugovaných řetězci!!!) a  $L = 17,175 \text{ \AA}$ . HOMO orbital bude na hladině  $n = 11$  a LUMO na  $n = 12$ .

$$\Delta E = E_{12} - E_{11} = 4,698 \times 10^{-19} \text{ J} = 2,93 \text{ eV} = 282,92 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\lambda = 423 \text{ nm}$$

Je třeba si uvědomit že vlnová délka, kterou jsme vypočítali, odpovídá absorbovanému záření, a tedy molekula bude mít barvu doplňkovou k této absorbované barvě. V našem případě odpovídá  $\lambda = 423 \text{ nm}$  modrému světlu, a proto by měla být molekula  $\beta$ -karotenu žlutá (viz doplňkové barvy). Výpočet souhlasí se skutečností, protože zředěné roztoky, ve kterých jsou molekuly relativně daleko od sebe a lze je považovat za izolované, mají opravdu žlutou barvu.

(1,00 b.)



**A3 – Termodynamický guláš**

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

11 bodů

1. Řešení:

- (a) Hoření dřeva je exotermický děj, protože se při něm uvolňuje teplo. Změna tepla je tedy záporná.
- (b) Při ohřívání guláše je třeba guláši dodat teplo, jedná se o endotermický děj, při kterém je změna tepla kladná.

**(0,75 b.)**2. Nejprve je třeba spočítat hmotnost vody, hustota vody při 10 °C je přibližně 1 g cm<sup>-3</sup>:

$$m = \rho V = 1 \text{ g cm}^{-3} \times 250 \text{ cm}^3 = 250 \text{ g} = 0,25 \text{ kg}$$

Voda byla zahřáta z 10 °C na 90 °C, rozdíl v teplotě je tedy 80 °C, neboli 80 K.

$$\Delta T = 90 \text{ }^\circ\text{C} - 10 \text{ }^\circ\text{C} = 80 \text{ }^\circ\text{C} = 80 \text{ K}$$

Dále vypočítáme teplo, které je třeba dodat, aby se voda ohřála.

$$Q = mc\Delta T = 0,25 \text{ kg} \cdot 4,2 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1} \cdot 80 \text{ K} = 84\,000 \text{ J}$$

Rychlovarná konvice má výkon 1 000 W, protože 1 W = 1 J s<sup>-1</sup>, za sekundu přijme voda energii 1 000 J. Potřebných 84 000 J tedy přijme za (84 000 J)/(1 000 J) = 84 s, což je 1,4 minuty.**(1,50 b.)**3. Vzhledem k tomu, že  $-Q_{10} = Q_{90}$ , platí rovnost:

$$-m_{10} \cdot c \cdot \Delta T_{10} = m_{90} \cdot c \cdot \Delta T_{90}$$

Uvažujeme, že tepelná kapacita vody bude shodná na obou stranách rovnice (v praxi je tepelná kapacita závislá na teplotě, pro tyto dvě teploty se ale liší jen minimálně). Rovnici tedy můžeme upravit na:

$$-m_{10} \cdot \Delta T_{10} = m_{90} \cdot \Delta T_{90}$$

Dále můžeme vyjádřit poměr hmotností:

$$\frac{m_{10}}{m_{90}} = \frac{-\Delta T_{90}}{\Delta T_{10}}$$

Následně je třeba vypočítat rozdíly v teplotách:

$$\Delta T_{10} = 50 \text{ }^{\circ}\text{C} - 10 \text{ }^{\circ}\text{C} = 40 \text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$\Delta T_{90} = 50 \text{ }^{\circ}\text{C} - 90 \text{ }^{\circ}\text{C} = -40 \text{ }^{\circ}\text{C}$$

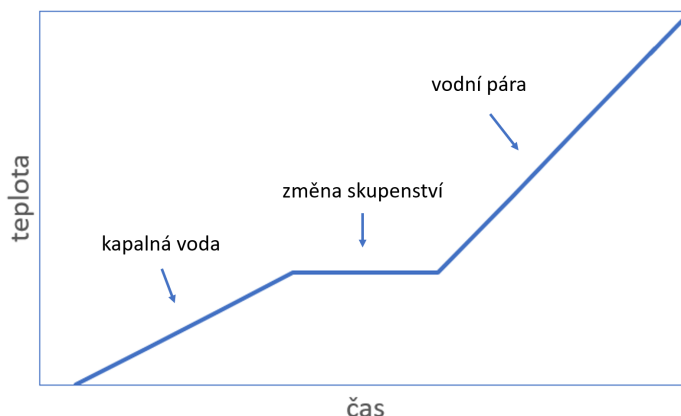
Rozdíly teplot se dosadí:

$$\frac{m_{10}}{m_{90}} = \frac{-\Delta T_{90}}{\Delta T_{10}} = \frac{-(-40)}{40} = 1$$

Poměr hmotností je tedy 1:1. Pokud zanedbáme rozdíly v hustotě, čímž se nedopouštíme nijak závažné chyby (zvláště když uvažujeme následné reálné provedení přípravy kávy), hrnek bude z poloviny naplněný 10 °C vodou a z poloviny 90 °C vodou. Do 250ml hrníčku je tedy třeba nalít 125 ml vody z rychlovarné konvice.

(1,50 b.)

4. Dokud je voda kapalná, teplota roste. Jakmile se voda začíná přeměňovat na plyn, je teplo spotřebováváno na skupenskou přeměnu, teplota zůstává stejná. Po vzniku plynu teplota v čase roste prudčeji než v případě kapalně vody, protože vodní pára má menší tepelnou kapacitu. Stačí jí tedy méně tepla na to, aby se ohřála o 1 °C.



Graf 1: Závislost teploty na čase.

(0,75 b.)

5. V nádržce je 250 ml vody, při teplotě 25 °C je hustota vody 0,997 g cm<sup>-3</sup>. Hmotnost vody tedy odpovídá:

$$m = \rho V = 0,997 \text{ g cm}^{-3} \cdot 250 \text{ cm}^3 = 249 \text{ g}$$

Látkové množství vody je pak rovno:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{249 \text{ g}}{18,02 \text{ g mol}^{-1}} = 13,8 \text{ mol}$$

(0,50 b.)

6. Změna výparné entalpie je rovna standardní výparné entalpii vynásobené látkovým množstvím. Tento vztah lze také odvodit z jednotky standardní výparné entalpie, což je  $\text{kJ mol}^{-1}$ , entalpii v kJ tedy dostaneme vynásobením standardní výparné entalpie v  $\text{kJ mol}^{-1}$  látkovým množstvím v mol.

$$\Delta_{v\acute{y}p}H = \Delta_{v\acute{y}p}H^\circ \cdot n = 40,656 \text{ kJ mol}^{-1} \cdot 13,8 \text{ mol} = 561 \text{ kJ}$$

(0,50 b.)

7. Hmotnost vzduchu se vypočítá z jeho objemu a hustoty:

$$m = \rho V = 1,18 \text{ kg m}^{-3} \cdot 20,0 \text{ m}^3 = 23,6 \text{ kg}$$

(0,25 b.)

8. Vztah pro výpočet změny teploty při známé entalpii bude analogický vztahu pro výpočet tepla, protože entalpie je teplo, akorát za konstantního tlaku:

$$Q = mc\Delta T \Rightarrow \Delta_{v\acute{y}p}H = mc\Delta T$$

Odtud vyjádříme  $\Delta T$ :

$$\Delta T = \frac{\Delta_{v\acute{y}p}H}{mc} = \frac{561 \text{ kJ}}{23,6 \text{ kg} \cdot 1,006 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}} = 23,6 \text{ K} = 23,6 \text{ }^\circ\text{C}$$

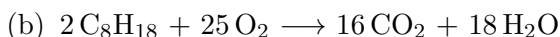
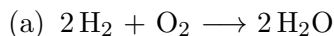
Teplota v jeskyni se sníží o  $23,6 \text{ }^\circ\text{C}$ .

(0,50 b.)

9. Jestliže odpaření vody trvá 4 hodiny, měla by se jeskyně ochladit o  $1 \text{ }^\circ\text{C}$  každých 10 minut. Vzhledem k tomu, že jeskyně netěsní, navíc se předpokládá, že v ní je neandrtálec, který tuto jeskyni zahřívá svým tělesným teplem, určitě se nejedná o dostatečnou rychlost chlazení pro celou jeskyni. Takovýto přístroj zvládne ochladit maximálně malý osobní prostor. V praxi se proto prodávají ochlazovače vzduchu o objemu nádrže okolo 8 litrů, které mají mnohem větší výkon.

(0,50 b.)

10. Řešení:



(0,50 b.)

11. Vycházíme z rovnice 10. a) a dosadíme do vzorce hodnoty z Tabulky 1:

$$\Delta_r H^\circ = \sum_{\text{produkty}} \nu \cdot \Delta_{sluč} H^\circ - \sum_{\text{výchozí látky}} \nu \cdot \Delta_{sluč} H^\circ = 2 \cdot (-285,8 \text{ kJ mol}^{-1}) - 2 \cdot 0 - 1 \cdot 0$$

$$\Delta_r H^\circ = -571,6 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Abychom dostali entalpii spalování vodíku v  $\text{kJ kg}^{-1}$ , je třeba entalpii v  $\text{kJ mol}^{-1}$  vynásobit mol a podělit kg, tedy musíme entalpii v  $\text{kJ kg}^{-1}$  vydělit molární hmotností vodíku ( $\text{H}_2$ ) v  $\text{kg mol}^{-1}$ . Navíc entalpie vztažená na mol byla vypočítána pro celou reakci, kde jsou ovšem moly vodíku dva, takže to celé je třeba ještě dělit dvěma. Vzhledem k tomu, že tato úvaha není triviální a rovnici lze vyčíslit i neceločíselnými stechiometrickými koeficienty, byly uznávány i některé rozumné násobky entalpie (to stejné platí i pro úkol 12).

$$\Delta_r H^\circ (\text{kg}) = \frac{\Delta_r H^\circ (\text{mol})}{2 \cdot M} = \frac{-571,6 \text{ kJ mol}^{-1}}{2 \cdot 2,016 \times 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}} = -141,8 \text{ MJ kg}^{-1}$$

**(1,00 b.)**

12. Výpočet probíhá analogicky jako v úkolu 11, vychází ovšem z rovnice 10 b).

$$\Delta_r H^\circ = \sum_{\text{produkty}} \nu \cdot \Delta_{\text{sluč}} H^\circ - \sum_{\text{výchozí látky}} \nu \cdot \Delta_{\text{sluč}} H^\circ$$

$$\Delta_r H^\circ = 18 \cdot (-285,8 \text{ kJ mol}^{-1}) + 16 \cdot (-393,5 \text{ kJ mol}^{-1}) - 25 \cdot 0 - 2 \cdot (-255,1 \text{ kJ mol}^{-1})$$

$$\Delta_r H^\circ = -10\,930 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta_r H^\circ (\text{kg}) = \frac{\Delta_r H^\circ (\text{mol})}{2 \cdot M} = \frac{-10\,930 \text{ kJ mol}^{-1}}{2 \cdot 114 \times 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}} = -47,9 \text{ MJ kg}^{-1}$$

**(1,00 b.)**

13. Řešení:

- (a) Entalpie připadající na kilogram paliva je u benzínu (isooktanu) nižší. Z tohoto pohledu je vodík jakožto palivo pro pohon auta výhodnější.
- (b) Spalováním vodíku vzniká voda, která jakožto kapalná životnímu prostředí nijak neškodí (je-li čistá), ovšem vodní pára je významný skleníkový plyn přispívající ke globálnímu oteplování. V případě spalování benzínu vzniká mimo vody i oxid uhličitý, který je taktéž skleníkovým plynem. Pokud bychom se na tuto problematiku chtěli dívat kvantitativně, tak na 1 kg spáleného benzínu připadá menší hmotnost zplodin než na 1 kg spáleného vodíku, ale z 1 kg benzínu taktéž vzniká méně tepla. Pouze na základě vznikajících produktů při reakcích tedy nelze jednoznačně určit, které palivo má menší dopad na životní prostředí, ale lze konstatovat, že nepříznivý dopad na životní prostředí mají obě paliva.
- (c) Vodík je za běžných podmínek v plynném skupenství, benzín v kapalném. S kapalinou se snáze manipuluje při tankování, nevyžaduje žádné speciální postupy. Vodík má jako plyn mnohem menší hustotu, z toho důvodu má stejná hmotnost paliva mnohem větší objem, což je pro transport méně vhodné.

**(1,50 b.)**

14. Aby se kyj sám zvedl a někoho praštil po hlavě, musela by se energie z okolí (např. ve formě tepla) shromáždit na jedno místo. Tato větší uspořádanost systému ale vede ke snižování entropie, což u samovolných dějů není možné (samovolně entropie pouze roste). Entalpie v tomto ději nehraje zásadní roli, zvednutí kyje ani úder kyjem nepředstavují děje, kde by byl podstatný přenos nebo přeměna tepla. I kdybychom uvažovali, že zdroj energie pro zvednutí kyje bude teplo z okolí, pořád je třeba teplo dodat, což neodpovídá samovolnému ději. Není tedy možné, aby se kyj sám od sebe zvednul a praštil někoho po hlavě.

Někteří řešitelé uváděli, že pevná látka má nízkou entropii, a proto se kyj zvedne. Nejedná se ovšem o skupenskou přeměnu a entropie pevné látky zůstává stejná (atomy v kyji se vůči ostatním atomům při zvedání kyje nijak nemění).

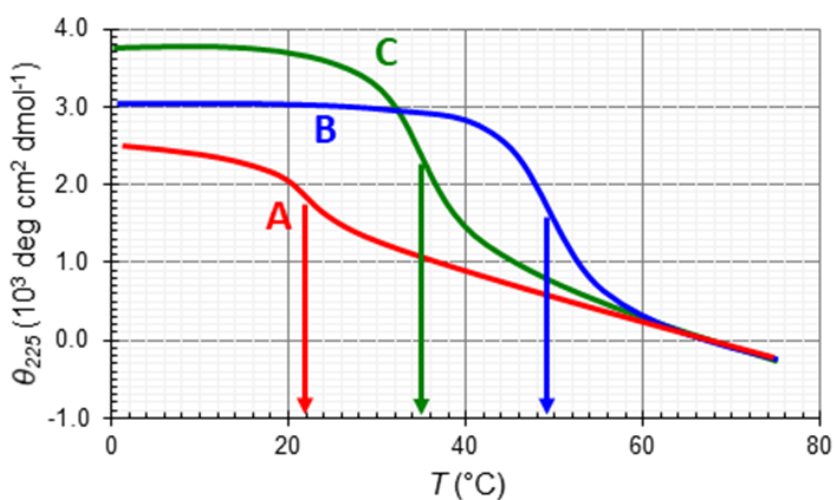
**(0,50 b.)**

### B3 – Hrátky s kolagenem – Tajeme s CDčkem

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

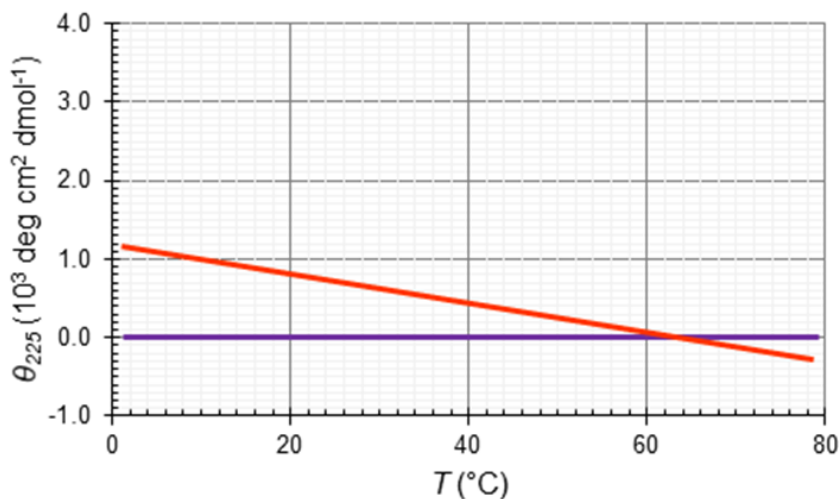
12 bodů

- Od nejstabilnější po nejméně stabilní:  $B > C > A$ . Vysvětlení v odpovědi k úkolu 2. (1,50 b.)
- Teplotu tání z grafu odečteme jako x-ovou souřadnici bodu, kde je křivka tání nejstrmější (viz obrázek níže). A taje při 22 °C, B taje při 49 °C a C taje při 35 °C. Tyto hodnoty také určují pořadí v úkolu 1.



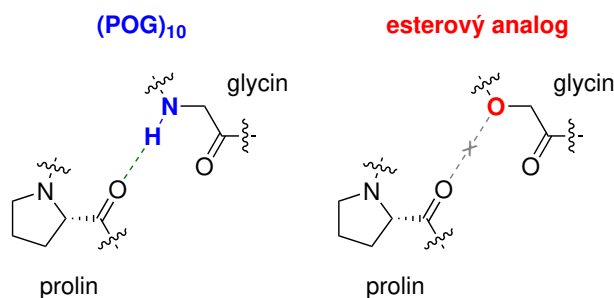
(1,00 b.)

- V ideálním případě by grafem byla přímka  $\Theta_{225} = 0$  popisující konstantní funkci (fialová níže). Ve skutečnosti je zde ale malá lineární závislost  $\Theta_{225}$  na teplotě, takže reálný graf by vypadal spíše jako klesající funkce (oranžová níže). Každopádně musí být grafem přímka, nikoliv sigmoidální křivka.



(1,00 b.)

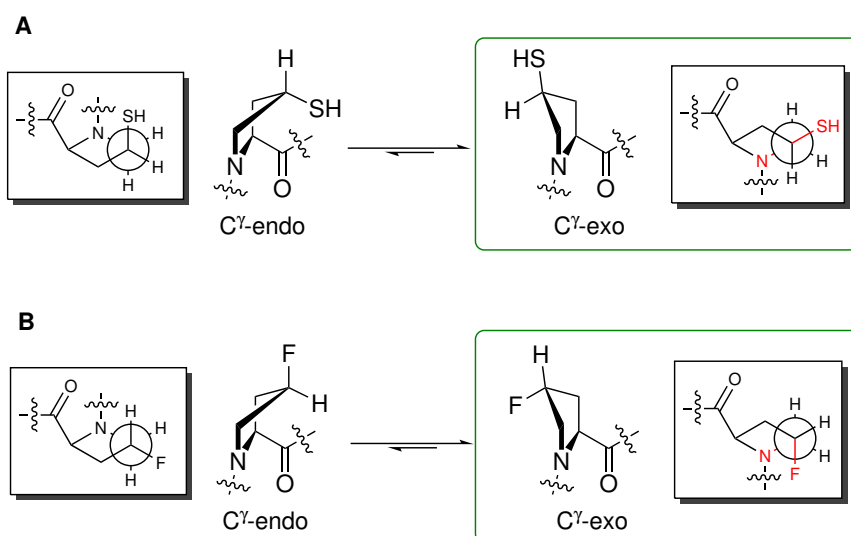
4. V první sérii jsme se dozvěděli, že pro stabilitu kolagenové trojšroubovice je důležitá vodíková vazba mezi NH-skupinou glycinu jednoho řetězce a CO-skupinou prolinu druhého řetězce. V esterovém analogu je NH-skupina vyměněna za kyslík, který nemůže být donorem vodíkového můstku. Proto tento analog nebude tvořit stabilní trojšroubovice, jinými slovy, jím tvořená trojšroubovice bude mít nižší  $T_m$ . 0,50 b. za určení, 1,00 b. za vysvětlení.



(1,50 b.)

5. V obou případech je stabilnější forma  $C^\gamma$ -exo, leč z jiného důvodu (určení preferované konformace  $2 \times 0,50$  b., nakreslení struktur níže  $2 \times 0,50$  b. – pro plný počet bodů je nutné správné zakreslení  $C^\gamma$ -endo i  $C^\gamma$ -exo formy, ale stačí jeden typ projekce). Zdůvodnění:

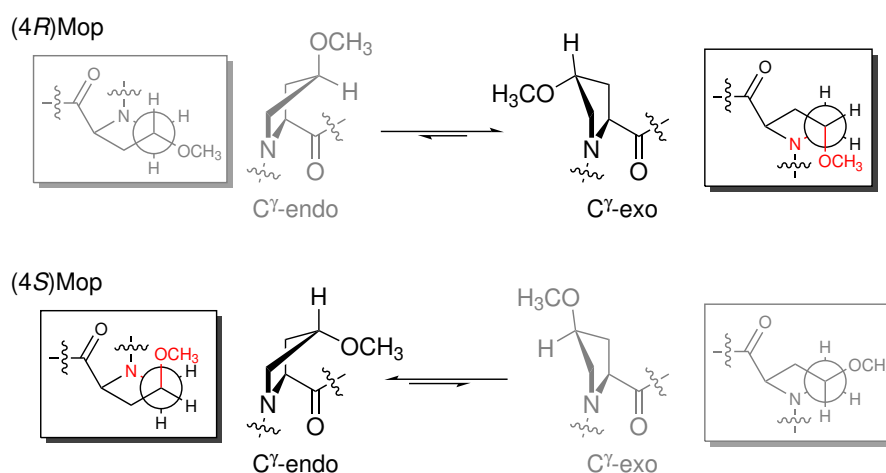
- (a) Sulfanylová SH skupina není elektronegativní substituent (síra má podobnou elektronegativitu jako uhlík). Plní tak pouze úlohu stericky objemného substituentu, který preferuje polohu *anti* vůči C–N vazbě (oproti *gauche*). Pro 4*S* konfiguraci je toto splněno v  $C^\gamma$ -exo formě (zvýrazněno červeně). (0,50 b.)
- (b) Fluor je oproti tomu malý a elektronegativní substituent, který (podobně jako OH v Hyp) preferuje *gauche* polohu vůči C–N vazbě. Pro 4*R* konfiguraci je toto splněno v  $C^\gamma$ -exo formě (zvýrazněno červeně). (0,50 b.)



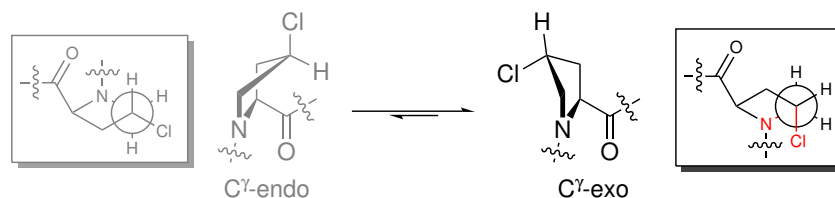
(3,00 b.)

6. Rozdíl mezi danými kolagenovými peptidy je vždy v jedné aminokyselině buďto v Xaa pozici, nebo Yaa pozici. Vyšší  $T_m$  má ta trojšroubovice, jejíž kolagenové peptidy v případě Xaa pozice obsahují aminokyselinu s rovnováhou posunutou více k  $C^\gamma$ -endo konformaci. Pro Yaa pozici rozhoduje naopak rovnováha posunutí více k  $C^\gamma$ -exo konformaci. Pro každou dvojici: určení stabilnější trojšroubovice – 0,50 b, vysvětlení – 0,50 b.

- (a) **(Pro-(4R)Mop-Gly)<sub>10</sub>** > **(Pro-(4S)Mop-Gly)<sub>10</sub>** – methoxyskupina (OCH<sub>3</sub>) obsahuje stejně jako hydroxyskupina (OH) elektronegativní kyslík, který bude vykazovat *gauche-efekt*. Ve 4R konfiguraci tento efekt vede ke konformaci  $C^\gamma$ -exo (výhodnější pro polohu Yaa), zatímco ve 4S konfiguraci ke konformaci  $C^\gamma$ -endo.



- (b) **(Pro-Pro-Gly)<sub>7</sub>** < **((4R)Mep-Pro-Gly)<sub>7</sub>** – jak Pro, tak (4R)Mep preferují  $C^\gamma$ -endo konformaci prolinu (viz obr. 3 v zadání), což je výhodné pro polohu Xaa. Jak bylo vysvětleno v textu úlohy, tento posun rovnováhy je výraznější pro (4R)Mep, díky čemuž je daná trojšroubovice stabilnější.
- (c) **(Pro-(4R)Hyp-Gly)<sub>10</sub>** < **(Pro-(4R)Flp-Gly)<sub>10</sub>** – pro polohu Yaa je výhodnější posun rovnováhy k  $C^\gamma$ -exo konformaci, což je splněno jak u (4R)Hyp, tak u (4R)Flp. Ovšem, jak je vysvětleno v textu úlohy, tento efekt je tím silnější, čím je daný substituent elektronegativnější. Fluor v (4R)Flp má větší elektronegativitu než kyslík v (4R)Hyp.
- (d) **(Pro-Pro-Gly)<sub>10</sub>** > **((4R)Clp-Pro-Gly)<sub>10</sub>** – chlor v (4R)Clp je elektronegativní substituent, který vede ke *gauche-efektu*. Tato aminokyselina proto preferuje konformaci  $C^\gamma$ -exo. Pro polohu Xaa je však preferovaná konformace  $C^\gamma$ -endo, proto je stabilnější trojšroubovice složená z prostých peptidů **(Pro-Pro-Gly)<sub>10</sub>**.



(4,00 b.)



### C3 – Chemické látky a člověk – dermální expozice II. část

Autorky: Lenka Suchánková a Simona Rozárka Jílková  
(e-mail: rozarka.jilkova@recetox.muni.cz)

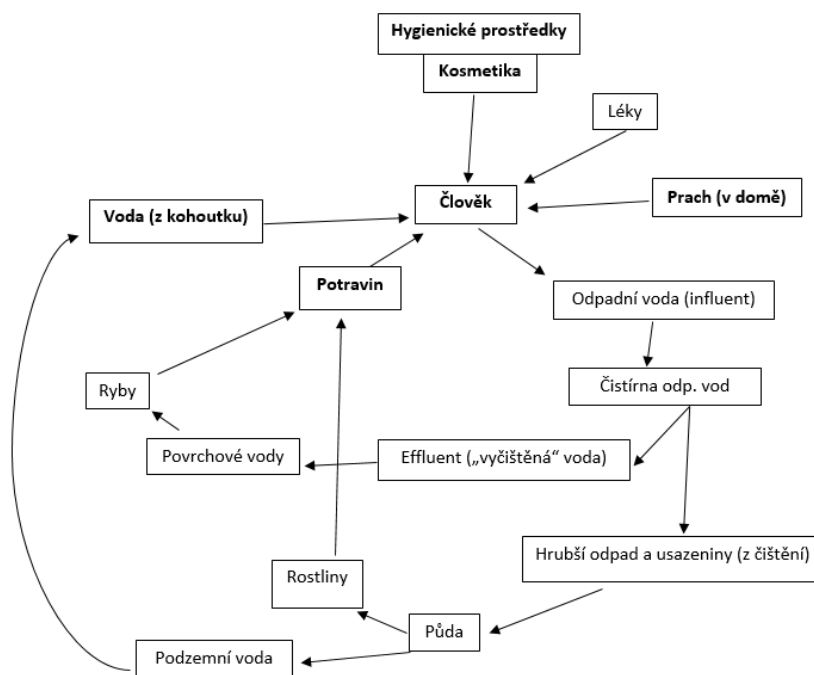
11 bodů

- Pojetí expozičních scénářů bylo mnoho. Hlavní expoziční cesta je dermální, tedy příjem látky přes povrch kůže (např. natření krému, použití sprchového gelu). A také bylo důležité zahrnout i parabeny, které se dostávají do přírody (třeba přes čističku odpadních vod) a z ní opět do lidského organismu (např. potravou).

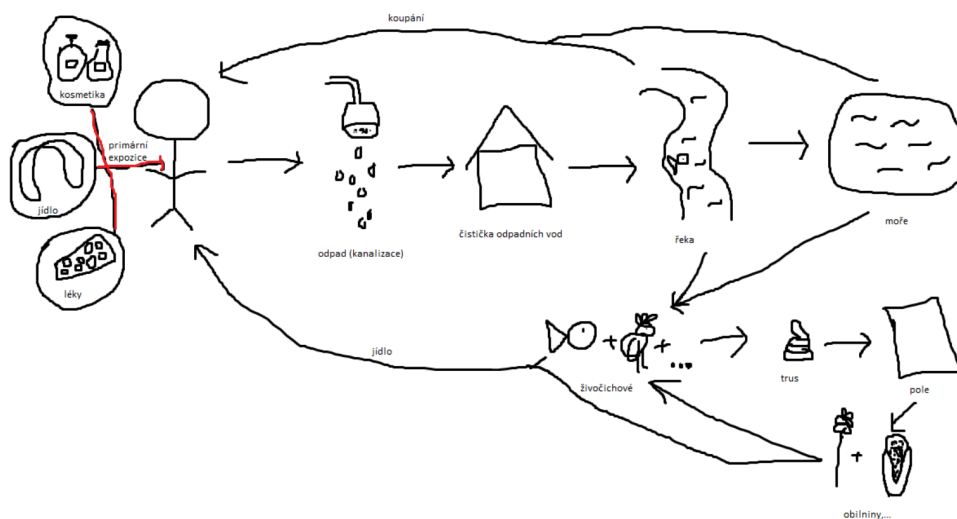
Přikládám pár scénářů od Vás, řešitelů.

(1,38 b.)

Expoziční scénář od Martina Lunera:



Expoziční scénář od Karolíny Zemene:



## Scénář v podání Tibora Malinského:

### Úkol 1

Vím, že se řeklo „nakreslit“, ale na to si netroufám. Snad obyčejný scénář bude stačit.

## EXPOZIČNÍ SCÉNÁŘ

### PRVNÍ DĚJSTVÍ

*Konferenční místnost společnosti Suchopryč, která vyrábí různou kosmetiku od vlhčených ubrousků přes deodoranty po voňavá mýdla. Zrovna probíhá schůze o zlepšení jejich šampónů.*

**ŘEDITEL:** Kopretinové šampóny jsou sice hitem, ale lidé nyní chtějí více, než krásnou vůni; chtějí bezpečí, chtějí zdraví! Nechtějí pouhý šampón, nýbrž prostředek, který zajistí, že nebudou mít mykózu, záněty a akné. Navíc si naše marketingové oddělení všimlo, že lidem vadí krátká trvanlivost našich produktů. Potřebujeme něco, co bude jak antimikrobiální, tak fungicidní a zároveň bude fungovat jako konzervant.

**INTERNISTA:** Pane řediteli, zrovna včera jsem si četl můj oblíbený týdeník Vědu v praxi a byl tam článek pojednávající o parabenech, které splňují přesně to, oč žádáte.

### DRUHÉ DĚJSTVÍ

*Kancelář výrobní haly. Ředitel mluví s vedoucím výroby a vysvětluje zavedení parabenů do šampónů.*

**VEDOUČÍ:** Ok.

*Sklad výrobní haly. Tři zaměstnanci hledají velkou žlutou krabici s nápisem PARABENY. Když ji naleznou, ještěrkou vezou do výrobní haly na počátek výroby. Při otevření postupně vytahují kýble připomínající kýble od barvy. Neboť jsou v místnosti, kde se zavádí paraben do šampónů, jeden z pracovníků otvírá kýbl a šahá rukou na obsah.*

**ZAMĚŠTNANEC Č. 1:** Ježišmarja! Vždyť nemáš rukavice! Kdo ví, co to je, kosmetice se už nedá věřit. Běž si to umýt! Doufej, že to půjde smýt vodou.

**ZAMĚŠTNANEC Č. 2:** Snad vím, co dělám, ne? Přeče by nás nenechali pracovat s něčím toxickým bez toho, aby nám to řekli. Začne rukou plácát o kalhoty, aby to ze sebe dostal. Není potřeba to mejt, stačí to oprášit.

**ZAMĚŠTNANEC Č. 3:** Proboha, kvůli tobě aby začal člověk nosit roušku.

### TŘETÍ DĚJSTVÍ

*Drogerie. Slečna M. vybírá šampón. Neví si rady, čte popisy produktů až to nakonec vzdá a ptá se prodavačky.*

**PRODAVAČKA:** Tenhle od Suchopryče je nějaká nová řada. Prý obsahuje jakési parabeny, díky čemuž mají delší trvanlivost, dále jsou antimikrobiální a fungicidní. Nemyslím si, že by zrovna taková mladá slečna potřebovala, ale myslím si, že se to nikdy neztratí.

**SLEČNA M.:** Jé, paráda! Tyhle mám hrozně ráda, ale přestala jsem je kupovat, když začaly divně zapáchat, sotva jsem byla v půlce balení. Třeba to teď bude lepší. Kolik vlastně stojí?

**PRODAVAČKA:** Jeden kus stojí 679, ale Máme akci 2+1 za 1 679 korun.

**SLEČNA M.:** Proboha.

### ČTVRTÉ DĚJSTVÍ

*Koupelna slečny M. Právě se dospřchovala a opouští sprchový kout. Mokré vlasy si zabaluje do ručníku tvoříc turban, druhý ručník má přes tělo a staví se před zrcadlo.*

**SLEČNA M.:** Prudce oddechne. Umýt ty mé kadeře je poslední dobou strašná fuška. Zhluboka se nadechuje a chvíli zdržuje dech. No, minimálně celá pěkně voním. Byl to ale dobrý kauf! Prohlíží se v zrcadle, posílá své selfie nejlepší kamarádce na Instagramu a začne necíleně projíždět Facebook. Po chvíli se ozývá se hlasitý zvuk odtoku ze sprchového koutu, jenž připomíná kručení břichy velryby. Šmankote! Možná bych měla pročistit odtok. Šahá pod umyvadlo. Hydroxid sodný, společník koupelnový! Sype do odtoku. Zajímalo by mě, jestli to nějak neovlivňuje životní prostředí. Nejen ten hydroxid, ale všechny ty šampóny a kosmetika. Voda sice jde posléze do čistíren, ale vyčistí se všechno? A co ty parabeny... nenarušují nějak... já nevím. Mikroflóru? Nebo faunu? Na sobě mít houby sice nechci, ale zas bych nerada narušila biodiverzitu tam venku. Hmmm. Opět bere do ruky mobil a začne googlit dopady na životní prostředí a na sebe samou.

Letmé ukázky novinových článků pojednávající o různých vyrážkách způsobené kosmetikou. Jako na hlavního viníka se ukazuje na nově používané parabeny. Ukázky jednotlivých případů jsou návštěvy doktora po použití produktů společnosti Suchopryč, ale také po požití různých sladkostí od Nestelē. Mezi hlavní návštěvníky doktora patří zejména zaměstnanci v čistírnách vody. Ze článků ovšem není zřejmé, zdali za to parabeny opravdu mohou, jedná se spíše o dohad. Dále novinové články zobrazují kontaminovanou podzemní vodou v oblasti čistíren vody a také na zvláštní aktivitu okolo lesních potoků, které od jednotlivých čistíren nejsou příliš daleko.

### PÁTÉ DĚJSTVÍ

Fakulta technologie ochrany prostředí Vysoké školy chemicko-technologické. Inženýra pracujícího na své dizertační práci ve své laboratoři vyruší kolega z vedlejší laboratoře. V ruce drží článek od Elsevieru a vypadá nadšeně.

KOLEGA: Koukej! Od děkana tu mám tohle. Zjištěna kontaminace parabeny!

INŽENÝR: No a co my s tím? Vždyť to hravě degradují nějaký bakterie v zemině, nebo ne?

KOLEGA: No to je sice pravda, ale na výzkum sanace kontaminovaného horninového prostředí parabeny je nyní vystaven grant. Tak jsem si říkal, poté, co jsi pracoval na odstranění trichlorethenu z podzemních vod pomocí in situ chemické oxidace, že bys třeba rád věnoval trochu svého času tomuto výzkumu s relativně jasným výsledkem a eventuálně mi trochu pomohl při zkoumání jeho toxicity. Co ty na to?

O několik týdnů a dnů později navštíví laboratoř inženýra student gymnázia. Rád by spolupracoval na nějakém výzkumu, se kterým by poté soutěžil ve středoškolské odborné činnosti.

INŽENÝR: Je to jednoduché. Tyhle parabeny se začaly používat jednak jako konzervanty, jednak pro své antimikro a antifungo-něco účinky. Problém ale nastal ve chvíli, kdy začaly unikat do přírody. Kontaminace podzemní vody je problém, protože to je zdroj pitné vody. Tyhle parabeny se ale snadno v přírodě degradují. V podstatě bychom to nemuseli ani řešit, ale co už. Každopádně! Jakmile se parabeny dostanou do vody a ta voda ven, tak začne procházet horninovým prostředím. To víš, co je, ne?

STUDENT: Samozřejmě. Zem, hlína, řekl se vzdušnými uvozovkami, se skládá z malých kousků minerálů, či kamínků, to je třeba písek. Mezi těmito částicemi se tvoří póry, ve kterých se drží voda většinou díky kapilárním silám. Záleží teda, ve které zóně se nacházíme, neboť obraz země se dělí na nasycenou a nenasycenou zónu. De facto díky těmto pórům může fungovat podzemní proudění. Pokud se prokopeme do nasycené zóny, tak vytvoříme jezero. Ještě jsem zapomněl zmínit, že některé půdy propouští lépe, to jsou třeba ty písčité, a některé hůře, to jsou jílovité. Tam můžeme vylévat hektolitry vody na jedno místo a ta voda se nedostane hlouběji než do dvou metrů. Záleží na velikosti pórů, propustnost udává hydraulická propustnost.

INŽENÝR: No, říkáš to skoro správně. Podstatné je to proudění. Takže co se stalo? V čistírnách se nezdegradovaly parabeny, ty unikly to horninového prostředí a díky onomu proudění se dostaly všude možně. Teď jak se jich zbavit? Máme dvě metody: in situ a ex situ. Buďto přímo do země vrazíme něco, co ty látky zdegraduje, oxidační činidlo třeba, nebo tu vodu odčerpáme a vyčistíme venku. Představa je to sice hezká, ale dovedeš si představit, jak dlouho trvá odčerpání veškerou podzemní vodu? To se dělalo dřív, když byla kontaminovaná půdní voda, což je obecně řečeno hloubka kořenů, ale když máš organické látky hustší než voda, třeba takový perchlorethen nebo trichlorethen, tak se ti usazují na dně a vzniká tzv. pool. To neodčerpáš. Jedna z in situ metod je chemická oxidace. Do zeminy naleješ oxidační činidlo a čekáš. Bude to ale fungovat na parabeny? Bude lepší chemická redukce? Nebo budeme muset zvolit jinou metodu? Náplň tvé práce zde bude to prozkoumat a vyzkoušet. Za laboratorních podmínek, samozřejmě!

STUDENT: *Nadšený.* To jsem ani nečekal, že tu budu moci s vámi provádět tak zajímavý, a hlavně aktuální výzkum! Kdy budu moci začít s výzkumem? A to budu pracovat přímo s těmi parabeny?

INŽENÝR: Přesně tak. Budeš jim vystaven! Hahá! Ničeho se neboj, dáme ti rukavice a ochranné brýle. Plášt si teda musíš donést svůj. Příští týden se stav, podepíšeme různé smlouvy a potom se na to vrhnem.

*Opona červené barvy přichází zprava, pak se zhasne celý sál a po chvíli opět rozsvítí. Herci přichází na scénu a obecnostvo začne tleskat.*

### KONEC

2. Riziko je pravděpodobnost, že činitel způsobí za daných podmínek expozice újmu. Nebo to je pravděpodobnost, že nastane daná negativní událost za daných podmínek. Případně je riziko definováno jako součin velikosti následků a pravděpodobnosti, že k situaci dojde v určitém časovém období. Dá se také vyjádřit podobně jako hmotnostní zlomek:

$$\text{riziko} = \frac{\text{počet jedinců s újmou}}{\text{celkový počet jedinců}}$$

Př.: Jaké je riziko, že vám z čtení téhle odpovědi pukne hlava?

$$\text{riziko (puknutí hlavy při čtení tohoto textu)} = \frac{\text{počet řešitelů s puknutou hlavou}}{\text{celkový počet řešitelů}}$$

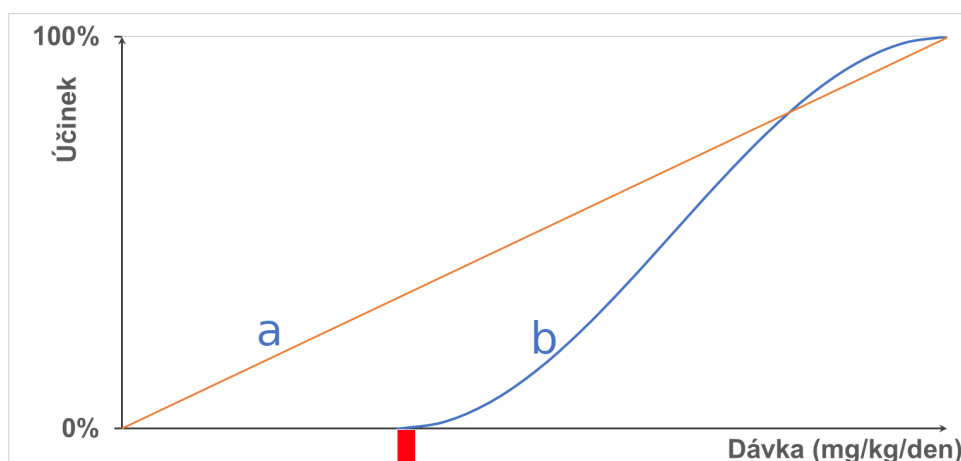
$$\text{riziko (puknutí hlavy při čtení tohoto textu)} = \frac{2}{40} = 0,05 \Rightarrow 5 \%$$

Pokud čtete tento text, máte **smyšlené** pětiprocentní riziko na puknutí hlavy ☺.

Rizikovými aktivitami je vše, co děláme. Například smrt nám hrozí kdykoliv a kdekoliv, dokud žijeme. Ano, když jedeme v autě  $50 \text{ km hod}^{-1}$  je riziko nižší, než když se řítíme rychlostí  $150 \text{ km hod}^{-1}$ . Ale riziko tu stále je. Stejně tak i když jenom ležíme v posteli. I tak můžeme umřít. Tedy žádné aktivity nejsou nerizikové, všechny aktivity mají nějaké riziko. A záleží jen na společnosti, kde si určí hranici přijatelného rizika. Proto se určilo, že v obci se smí jezdit  $50 \text{ km hod}^{-1}$ , proto jsou některé chemické pokusy zakázány (ale některé, pokud jde o přípravu na povolání, naopak povoleny). Proto řešíme hodnocení rizik (risk assessment) a konkrétně u chemických látek zjišťujeme referenční dávky a koncentrace chemických látek kolem nás, abychom byli schopni rizika řídit.

(0,69 b.)

3. (a) Prahový účinek – modrá křivka, (b) – bezprahový účinek – oranžová křivka. Práh je vyznačen na obrázku 1.



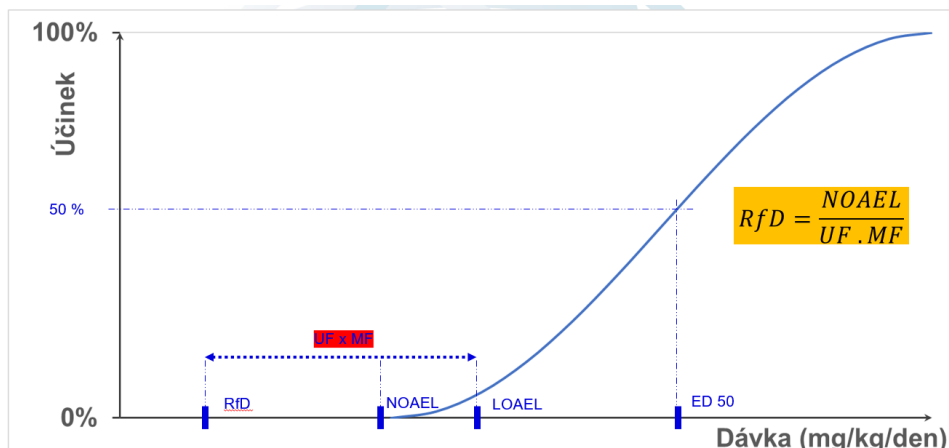
**Obr. 1:** Graf závislosti dávka-účinek pro látky s prahovým (a) a bezprahovým (b) účinkem. Práh, kde dané množství dávky vyvolává nenulový účinek, je vyznačen červenou úsečkou na ose  $x$ .

(1,03 b.)

4. Příjem je menší než referenční dávka, a tedy daný příjem není pro danou populaci rizikovým.

(0,34 b.)

5. Řešení:



**Obr. 2:** Závislost dávka-účinek pro látky s prahovým účinkem. Vyznačeny jsou referenční dávka ( $RfD$ ), dávka, při které nebyl pozorován žádný negativní efekt ( $NOAEL$ ), nejnižší dávka, při které byl pozorován negativní efekt ( $LOAEL$ ), efektivní dávka  $ED_{50}$ , při které je pozorován negativní efekt u 50 % populace, faktor nejistoty ( $UF$ ) a modifikační faktor ( $MF$ ).

(1,38 b.)

6. Referenční dávka pro methylparaben je  $0,25 \text{ mg kg}^{-1} \text{ den}^{-1}$  a pro butylparaben je referenční dávka  $0,0005 \text{ mg kg}^{-1} \text{ den}^{-1}$ . Butylparabenu tedy stačí přijmout do organismu méně, aby vyvolal negativní efekt, butylparaben je tedy při stejné dávce toxičtější jak methylparaben.

$$RfD_{\text{methylparaben}} = \frac{NOAEL_{\text{methylparaben}}}{UF \cdot MF}$$

$$RfD_{\text{methylparaben}} = \frac{1000}{1000 \cdot 4}$$

$$RfD_{\text{methylparaben}} = 0,25 \text{ mg kg}^{-1} \text{ den}^{-1}$$

Methylparaben	
$UF$	1000
$MF$	4
$NOAEL$ ( $\text{g kg}^{-1} \text{ den}^{-1}$ )	1
$RfD$ ( $\text{mg kg}^{-1} \text{ den}^{-1}$ )	0,25

Butylparaben	
$UF$	1000
$MF$	4
$NOAEL$ ( $\text{g}/(\text{kg den})$ )	0,002
$RfD$ ( $\text{mg}/(\text{kg den})$ )	0,0005

(1,38 b.)

7. Možností výpočtu je více. Zde uvádím výpočet přes směšovací rovnici.

(a) Výpočet pro roztok A.

$$c_{\text{zásobní roztok}} \cdot V_{\text{zásobní roztok}} = c_A \cdot V_A$$

$$V_{\text{zásobní roztok}} = \frac{c_A \cdot V_A}{c_{\text{zásobní roztok}}}$$

MeP a BuP:

$$V_{\text{zásobní roztok (MeP nebo BuP)}} = \frac{5 \mu\text{g ml}^{-1} \cdot 1 \text{ ml}}{50 \mu\text{g ml}^{-1}}$$

$$V_{\text{zásobní roztok}} = 0,1 \text{ ml} = 100 \mu\text{l}$$

EtP:

$$V_{\text{zásobní roztok (MeP nebo BuP)}} = \frac{5 \mu\text{g ml}^{-1} \cdot 1 \text{ ml}}{100 \mu\text{g ml}^{-1}}$$

$$V_{\text{zásobní roztok}} = 0,05 \text{ ml} = 50 \mu\text{l}$$

Methanol:

$$V_A = V_{\text{MeP}} + V_{\text{EtP}} + V_{\text{BuP}} + V_{\text{methanol}}$$

$$V_{\text{methanol}} = V_A - (V_{\text{MeP}} + V_{\text{EtP}} + V_{\text{BuP}})$$

$$V_{\text{methanol}} = 1 - (0,1 + 0,05 + 0,1)$$

$$V_{\text{methanol}} = 0,75 \text{ ml} = 750 \mu\text{l}$$

Do vialky pro roztok A napipetují 100  $\mu\text{l}$  MeP, 100  $\mu\text{l}$  BuP, 50  $\mu\text{l}$  EtP a 750  $\mu\text{l}$  methanolu.

(b) Výpočet pro roztok B.

$$c_A \cdot V_A = c_B \cdot V_B$$

$$V_A = \frac{c_B \cdot V_B}{c_A}$$

$$V_A = \frac{0,5 \mu\text{g ml}^{-1} \cdot 1,5 \text{ ml}}{5 \mu\text{g ml}^{-1}}$$

$$V_A = 0,15 \text{ ml} = 150 \mu\text{l}$$

Methanol:

$$V_B = V_A + V_{\text{methanol}}$$

$$V_{\text{methanol}} = V_B - V_A$$

$$V_{\text{methanol}} = 1,5 - 0,15 = 1,35 \text{ ml} = 1\,350 \mu\text{l}$$

Do vialky pro roztok B napipetují 150  $\mu\text{l}$  roztoku A a 1 350  $\mu\text{l}$  methanolu.

(c) Výpočet přídatku ke vzorku.

$$m_{\text{přidaných ftalátů z roztoku B}} = c_B \cdot V_B$$

$$V_B = \frac{m_{\text{přidaných ftalátů z roztoku B}}}{c_B}$$

$$V_B = \frac{100 \text{ ng}}{0,5 \mu\text{g ml}^{-1}} = \frac{0,1 \mu\text{g}}{0,5 \mu\text{g ml}^{-1}}$$

$$V_B = 0,2 \text{ ml} = 200 \mu\text{l}$$

Ke vzorkům napipetují 200  $\mu\text{l}$  roztoku B.

(2,04 b.)

8. 4 316 211  $\text{ng g}^{-1}$ ; 4,316  $\text{g kg}^{-1}$ ; množství methylparabenu je větší než limit daný nařízením EU, a proto by měl být šampon stažen z prodeje.

$$w_{\text{methylparaben}} = \frac{\frac{S_{\text{vzorek}}}{S_{\text{ISTD}}} \times m_{\text{ISTD}}}{m_{\text{vzorku}}}$$

$$w_{\text{methylparaben}} = \frac{\frac{510\,910}{133} \times 100}{0,089}$$

$$w_{\text{methylparaben}} = 4\,316\,211 \frac{\text{ng}}{\text{g}} = 4,316 \text{ g kg}^{-1}$$

(0,69 b.)



9. Pro ženu:  $0,383 \text{ mg kg}^{-1} \text{ den}^{-1}$ ; Pro muže:  $0,237 \text{ mg kg}^{-1} \text{ den}^{-1}$ .

$$EDI_{\text{methylparaben z šamponu, pro ženu}} = \frac{(CS \cdot Mn \cdot Pr \cdot ED)}{(BW \cdot AT)}$$

$$EDI_{\text{methylparaben z šamponu, pro ženu}} = \frac{(4316 \cdot 0,01239 \cdot 0,43 \cdot 25550)}{(60 \cdot 25550)}$$

$$EDI_{\text{methylparaben z šamponu, pro ženu}} = 0,383 \text{ mg kg}^{-1} \text{ den}^{-1}$$

(0,69 b.)

10. *EDI* je pro ženy vyšší jak *RfD*, pro muže nižší. *HI* pro ženy je 1,53 a pro muže 0,947. Expozice pro ženy není bezpečná, výrobek by měl být stažen z prodeje, což je stejný závěr jako v úloze 8 při porovnávání limitů.

$$HI_{\text{methylparaben z šamponu, pro ženu}} = \frac{EDI_{\text{methylparaben z šamponu, pro ženu}}}{RfD_{\text{methylparaben}}}$$

$$HI_{\text{methylparaben z šamponu, pro ženu}} = \frac{0,383}{0,25} = 1,53$$

(0,69 b.)

11. Například umývání pásů při každé změně zboží (jak změna druhu, tak dodavatele). Nebo balírnu mít zaměřenou pouze na balení jednoho druhu ovoce/zeleniny, nebo takových druhů, které mají stejné limity pro residua pesticidů. Navrhovali jste i různé pásy, nebo pásy potáhnout ochranou fólií, která se bude vždy měnit.

(0,69 b.)