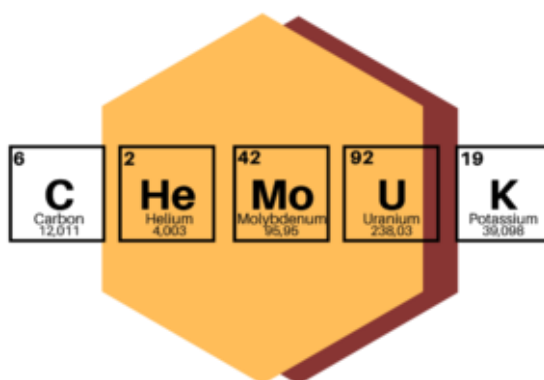




2025/2026

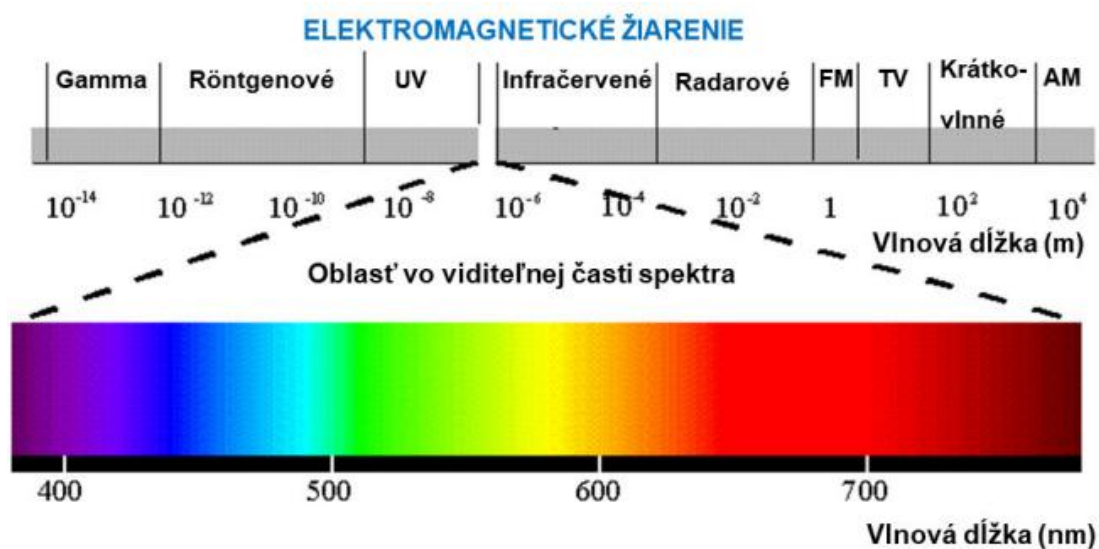
3. kolo

Zadanie

Svetelný podpis chrómu

Lucia Mikulcová (mikulcova20@uniba.sk)

Optické metódy v analytickej chémii využívajú elektromagnetické žiarenie v širokom rozsahu vlnových dĺžok, od röntgenového až po rádiových frekvencií. Najčastejšie využívané sú žiarenia v ultrafialovej, viditeľnej či infračervenej oblasti. Celé spektrum elektromagnetického žiarenia je možné pozorovať na obrázku č. 1.



Obrázok 1. Spektrum elektromagnetického žiarenia.

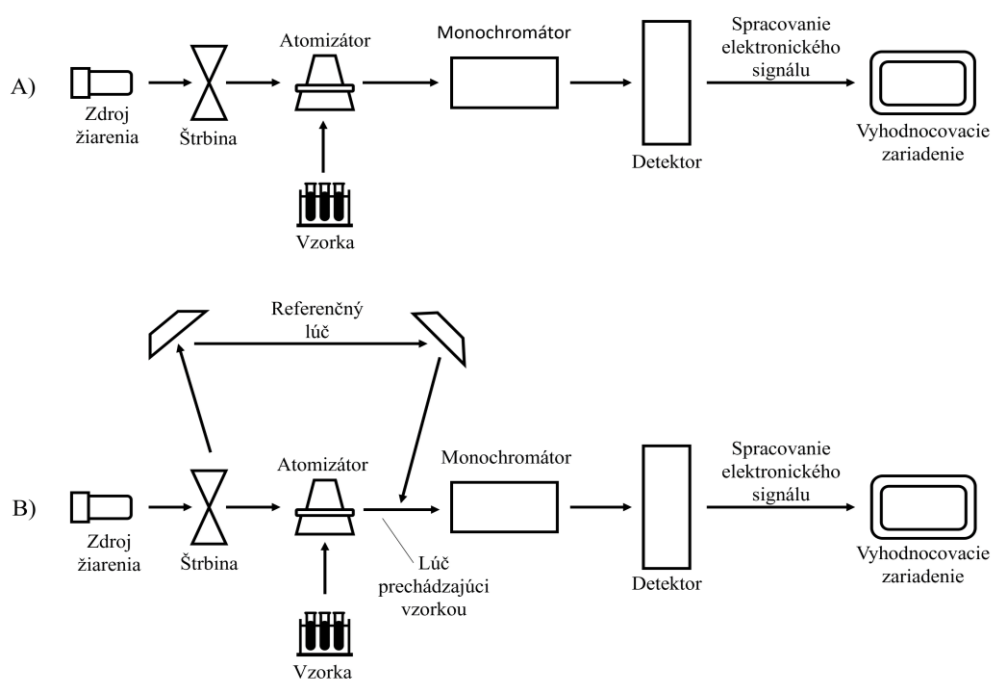
Pri **atómovej absorpčnej spektrometrii** (AAS) dochádza k interakciám elektromagnetického žiarenia so vzorkou, ktorá je uvedená do plynného stavu pomocou atomizátora. Pri prechode žiarenia cez vzorku dochádza k zoslabeniu intenzity žiarenia z primárneho zdroja, spôsobenej absorpciou / pohltitím žiarenia analyzovanými atómami prvku v plynnom stave. Detektor prístroja zachytáva prepustené žiarenie a porovnaním s pôvodnou intenzitou žiarenia pri konkrétnej vlnovej dĺžke, vyhodnocuje mieru absorpcie analytom.

Absorbancia (A) je definovaná ako miera absorpcie/pohltienia svetla skúmanou látkou, resp. analytom. Patrí medzi bezrozmerné veličiny a môže nadobúdať hodnoty 0 až ∞ . Absorbancia sa používa na znázornenie absorpčných spektier v závislosti od vlnovej dĺžky. Kvantitatívny parameter, ktorý vyjadruje koncentráciu analyzovanej látky na základe nameranej absorbancie, možno vyjadriť pomocou **Lambertovho-Beerovho zákona**, pre ktorý platí:

$$A = a_{\lambda} \cdot c \cdot l$$

kde a_λ je atómový absorpčný koeficient [$\text{dm}^3 \text{mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$], l hrúbka absorpčnej vrstvy, teda šírka kyvety [cm] a c koncentrácia analytu vo vzorke, teda počet voľných atómov v jednotke objemu vzorky [mol dm^{-3}], pričom v niektorých prípadoch je vhodnejšie vyjadriť hmotnostnú koncentráciu c_m [g dm^{-3}]. Namerané hodnoty absorbancie sú teda priamo úmerné koncentrácii analytu nachádzajúcej sa vo vzorke.

Na meranie absorbancie atómov nachádzajúcich sa vo vzorke sa využívajú **atómové absorpčné spektrometre**. Tie sa skladajú z niekoľkých základných častí, ktorými sú primárny zdroj žiarenia, atomizátor, monochromátor, detektor a vyhodnocovacie zariadenie. Schematické zobrazenie atómového absorpčného spektrometra je uvedené na obrázku č. 2.



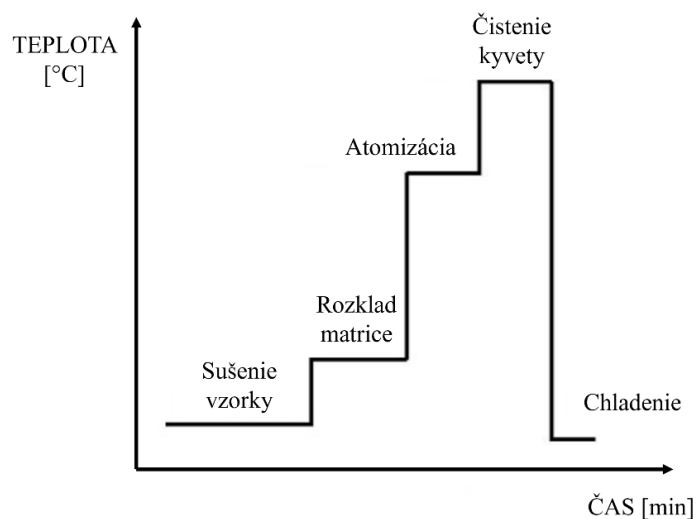
Obrázok 2. Schéma jednolúčového A) a dvojlúčového B) atómového absorpčného spektrometra.

V prípade **atómovej absorpčnej spektrometrie s elektrotermickou atomizáciou** (ETAAS) sa využíva bezplameňový elektrotermický atomizátor. Tento atomizátor využíva elektricky vyhrievaný žiaruvzdorný materiál (grafit, volfrám), najčastejšie vo forme kyvety do ktorej sa nadávkuje malý objem roztoku vzorky, rádovo mikrolitre až desiatky mikrolitrov. Zvoleným vhodným teplotným programom pre konkrétnu analýzu sa postupne zohrieva a prechádza niekoľkými krokmi teplotného programu.

Teplotný program sa skladá z piatich základných krokov, ktorými sú:

1. **Sušenie**; suší sa vzorka, odparuje sa rozpúšťadlo ($50-200^{\circ}\text{C}$)
2. **Pyrolýza**; rozkladá sa zvyšok materiálu vzorky ($500-2000^{\circ}\text{C}$)
3. **Atomizácia**; tvoria sa voľné atómy analytu (prvku) v plynnej fáze ($2000-3000^{\circ}\text{C}$)
4. **Čistenie**; odparuje sa zvyšok vzorky a vypáli sa kyveta od nečistôt (zvyčajne o 200°C viac ako krok atomizácie)
5. **Chladenie**; dosahuje sa počiatočná teplota systému.

Všeobecný teplotný program je popísaný na obrázku č. 3. Po celú dobu procesu teplotného programu sa absorpčná kyveta nachádza v inertnej atmosfére argónu, ktorý zabraňuje jej poškodeniu.



Obrázok 3. Teplotný program metódy ETAAS.

Úloha č. 1 Na základe teoretických vedomostí z úvodu priradíte v tabuľke č. 1 vhodné teploty alebo názvy kroku teplotného programu ETAAS v prípade stanovenia chrómu (Cr) vo vzorke vody.

Teploty na výber:

Sušenie- 130°C , 350°C

Pyrolýza- 450°C , 1600°C , 2100°C

Čistenie kyvety- 2200°C , 2600°C

Tabuľka 1. Teplotný program ETAAS pre stanovenie chrómu.

Krok	Teplota [°C]
Sušenie vzorky	
Pyrolýza	
	2200
Čistenie kvety	

Správne spracovanie výsledkov po uskutočnených meraniach je rovnako dôležité ako správna a sústredená práca pri uskutočňovaní experimentu. Získaný signál z meraní je transformovaný na výsledok analýzy prostredníctvom porovnávania dosiahnutých signálov. Na takéto vyhodnotenie sa využívajú dva základné postupy a to **metóda kalibračnej krivky** a **metóda prídavku štandardu**.

Metóda kalibračnej krivky sa používa na zistenie, kvantitu určitého analytu, resp. aké množstvo analytu sa nachádza v neznámej vzorke.

Najprv si pripravíme sadu kalibračných roztokov, v ktorých **poznáme presnú koncentráciu** analytu. Každú z nich zmeriame prístrojom, ktorý nám poskytne **signál**, napr. absorbanciu. Platí, že čím viac analytu kalibračný roztok obsahuje, tým väčší je zvyčajne signál.

Tieto hodnoty potom zakreslíme do grafu:

- na **os x (vodorovnú)** vynesíme koncentráciu analytu **c** v kalibračnom roztoku,
- na **os y (zvislú)** vynesíme nameraný signál **S**, napr. absorbanciu **A**.

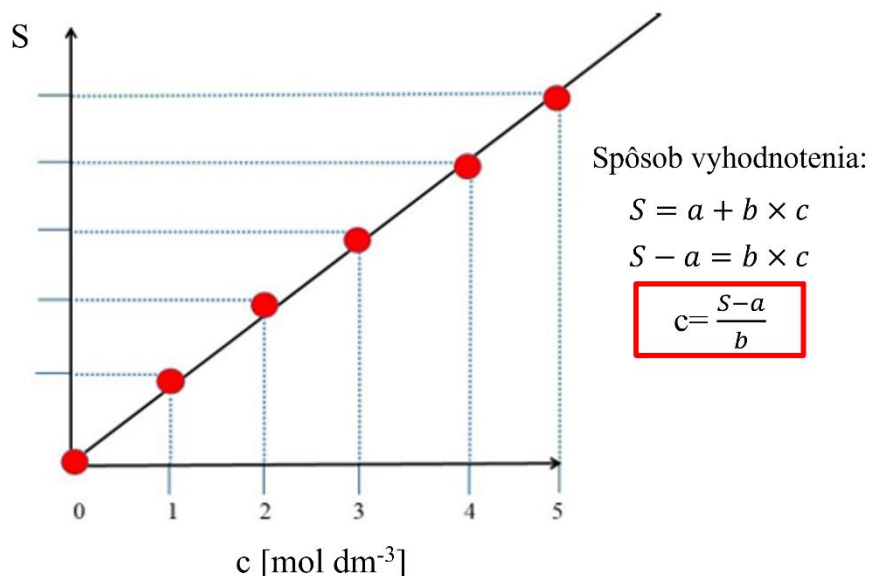
Body v grafe sa snažíme spojiť priamkou, ktorú nazývame **lineárna regresná priamka**. V ideálnom prípade najlepšie vystihuje závislosť medzi koncentráciou a signálom. Schéma takejto závislosti je uvedená na obrázku č. 4.

Všeobecný tvar lineárnej rovnice kalibračnej krivky je

$$S = a + b \times c$$

pričom hodnota **a** sa označuje ako úsek na osi y a opisuje hodnotu signálu, ktorú dosahuje vzorka s nulovou koncentráciou a hodnota **b** sa označuje ako smernica priamky, ktorá vyjadruje zmenu analytického signálu na jednotkovú zmenu koncentrácie vzorky. Čím je smernica **b** priamky vyššia, tým je metóda, ktorou sme získali danú rovnicu priamky citlivejšia. Ku každej rovnici prislúcha aj koeficient determinácie **R²**, ktorý vyjadruje, ako dobre popisujú získané experimentálne dáta ideálny lineárny model. Hodnota blízka 1,000 znamená lineárny priebeh pripravenej kalibračnej krivky.

Keď potom meriame **neznámu vzorku s neznámou koncentráciou analytu**, zistíme jej signál. Pomocou vytvorenej priamky v grafe, resp. rovnice tejto priamky $S = a + b \times c$ vieme z nameraného signálu S vypočítať, akú koncentráciu c má daná vzorka.



Obrázok 4. Zobrazenie metódy kalibračnej krivky.

Metóda prídavku štandardu sa používa na zistenie množstva analytu v neznámej vzorke, najmä keď je vzorka zložitá (napríklad obsahuje veľa rôznych látok).

Pre získanie priamky a prislúchajúcej rovnice postupujeme v troch krokoch.

1. Najprv zmeriame **signál pôvodnej vzorky**, napr. absorbanciu
2. Potom do rovnako pripravenej druhej vzorky pridáme **presne známe množstvo analytu**, ktorý chceme určiť (tento prídavok nazývame štandardom).
3. Znovu zmeriame signál takto upravenej vzorky.

Keďže vieme, koľko látky sme pridali, môžeme porovnať pôvodný signál a signál po pridaní známeho množstva analytu (štandardu). Z rozdielu signálov vieme vypočítať, koľko látky bolo vo vzorke už na začiatku. Prídavok štandardu ku vzorke sa následne opakuje niekoľkokrát so zvyšujúcou sa koncentráciou analytu.

Prečo sa táto metóda používa?

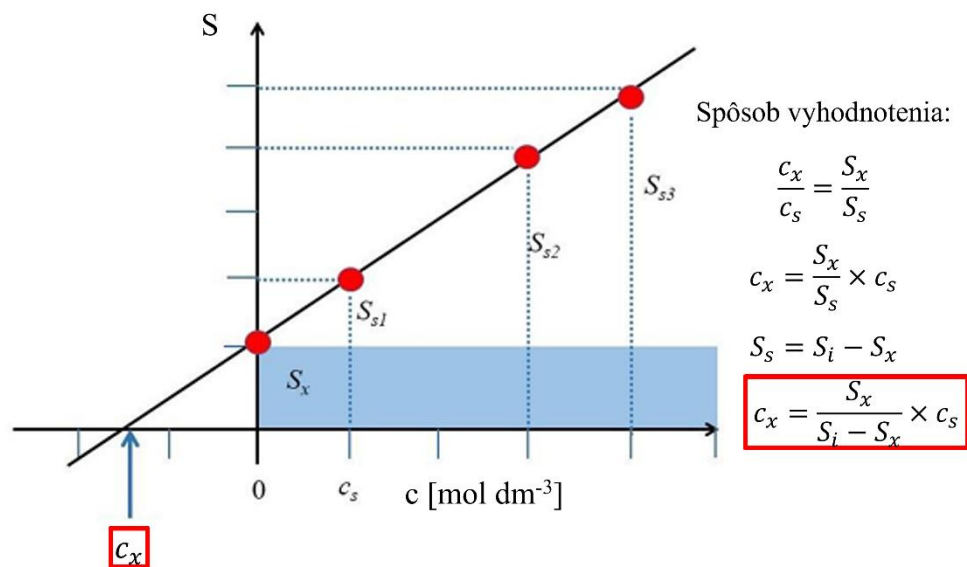
Niektoré vzorky sú zložité (napríklad krv, potraviny, riečna voda). Obsahujú veľa iných látok, ktoré môžu ovplyvniť meranie. Tento faktor sa nazýva **vplyv matrice vzorky**.

Pri metóde prídavku štandardu:

- vzorka zostáva stále rovnaká,

- len do nej pridávame malé známe množstvo štandardu analytu.

Touto metódou prídavku štandardu sa minimalizujú chyby spôsobené vplyvom matrice vzorky, teda prítomnosťou iných látok nachádzajúcich sa vo vzorke.



Obrázok 5. Zobrazenie metódy prídavku štandardu.

Pre vyhodnotenie koncentrácie analytu vo vzorke pred pridaním štandardu môžeme použiť dva spôsoby. Prvým spôsobom je vyjadrenie **graficky**, pri ktorom vzniknutú priamku predĺžime až do bodu c_x , kde priamka pretne os x. Takýto postup je zobrazený na obrázku č. 5. V tomto bode nadobúda hodnota koncentrácie c_x zápornú hodnotu a signál (absorbancia) nadobúda nulovú hodnotu. Preto rovnicu lineárnej závislosti vzniknutej vynesением tohto grafu a predĺžením priamky vyjadríme ako:

$$0 = a + b \times c_x$$

,z ktorej vypočítame koncentráciu c_x analytu v pôvodnej vzorke. Vypočítanú zápornú hodnotu koncentrácie vyjadrujeme ako absolútnu hodnotu.

Druhým spôsobom určenia koncentrácie analytu vo vzorke metódou prídavku štandardu je **výpočtom**. V tomto prípade postupujeme na základe vzťahu

$$\frac{c_x}{c_s} = \frac{S_x}{S_s}$$

a jeho následnou úpravou až na tvar:

$$c_x = \frac{S_x}{S_i - S_x} \times c_s$$

kde S_x je signál prislúchajúci vzorke bez prídavku štandardu, S_i je signál prislúchajúci jednotlivým vzorkám spolu s prídavkami štandardov, c_s je koncentrácia prídavkov štandardu, ktoré boli pridané ku vzorke a c_x je koncentrácia analytu vo vzorke bez prídavku štandardu. V prípade použitia viacerých prídavkov štandardu ku vzorke sa počíta aritmetický priemer získaných koncentrácií analytu v pôvodnej vzorke.

Absolútna chyba je rozdiel medzi nameranou a pravou (skutočnou) hodnotou meranej veličiny:

$$\Delta = x_i - \mu$$

kde Δ je absolútna chyba merania, x_i je nameraná hodnota, resp. vypočítaná hodnota veličiny súvisiaca s nameranou hodnotou a μ je skutočná hodnota. Jednotka absolútnej chyby merania je taká istá ako jednotka meranej veličiny. Absolútna chyba môže nadobúdať aj záporné hodnoty a hovorí, o koľko jednotiek sme sa odchýlili od skutočnej hodnoty danej veličiny.

Relatívna chyba je podiel absolútnej chyby merania a skutočnej hodnoty meranej veličiny. Relatívna chyba sa udáva v percentách:

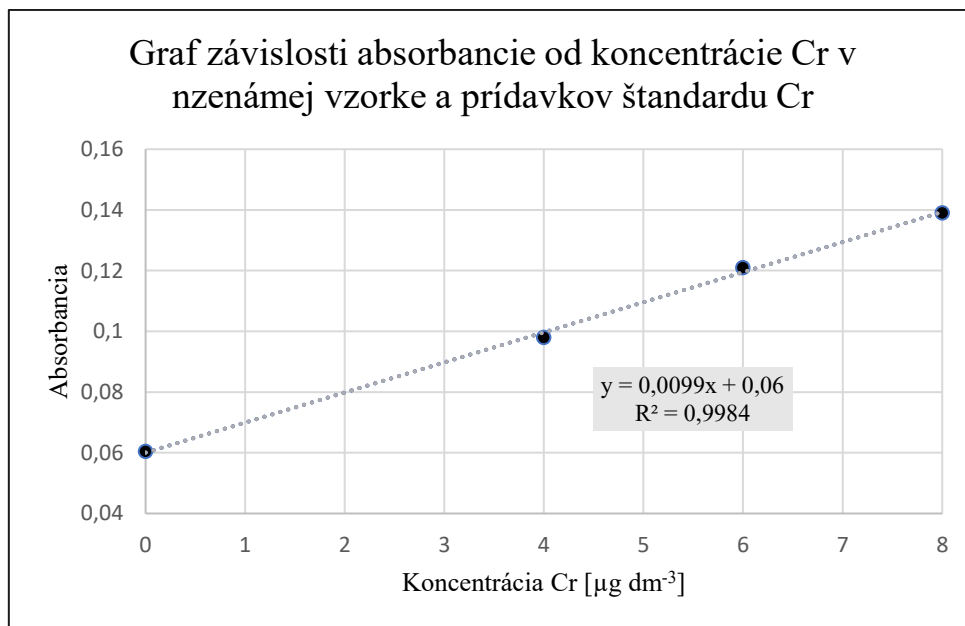
$$\delta(\%) = \frac{\Delta}{\mu} \cdot 100\%$$

kde $\delta(\%)$ je relatívna chyba, Δ je absolútna chyba merania a μ je skutočná hodnota. Relatívna chyba vyjadruje, aká je percentuálna chyba medzi nami získanej alebo vyhodnotenej hodnoty a celkovej skutočnej hodnoty.

Úloha č. 2 Po uskutočnení meraní metódou ETAAS využitím optimalizovaného teplotného programu metódy bolo uskutočnené opakované meranie kalibračných roztokov Cr dvomi pracovníkmi. Kalibračné roztoky Cr boli v koncentračnom rozpätí $0-10 \mu\text{g dm}^{-3}$. Od prvého pracovníka sme vynesím hodnôt koncentrácií kalibračných roztokov chrómu a ich dosiahnutých absorbancií do grafu dostali nasledovnú kalibračnú rovnicu: $y = 0,0121x + 0,0008$ s $R^2 = 0,9992$. V prípade vynesenia hodnôt koncentrácií kalibračných roztokov chrómu a ich dosiahnutých absorbancií do grafu sme od druhého pracovníka dostali nasledovnú kalibračnú rovnicu: $y = 0,0247x + 0,0034$ s $R^2 = 0,9981$.

- Z dvoch uvedených kalibračných rovníc vyberte tú, ktorej získané body presnejšie opisujú lineárny priebeh kalibračnej krivky a zdôvodnite svoj výber.
- Vytvorte spoločnú tabuľku pre obe kalibračné rovnice, kde uvediete ich smernice a úseky na osi y. Uveďte tiež na základe týchto hodnôt, ktorá z rovníc má vyššiu citlivosť.
- Vypočítajte hmotnostnú koncentráciu chrómu prítomného v neznámej vzorke vody metódou kalibračnej krivky ak absorbancia, ktorá bola nameraná pre neznámu vzorku je rovná 0,0605. Na výpočet použite rovnicu, ktorú ste zvolili v bode a) tejto úlohy a výsledok vyjadrite v jednotkách $\mu\text{g dm}^{-3}$.

Úloha č. 3 K rovnakej neznámej vzorke vody boli pridané tri prídavky roztoku štandardu chrómu s hmotnostnou koncentráciou 4, 6 a 8 $\mu\text{g dm}^{-3}$ a uskutočnené merania technikou ETAAS s rovnakým teplotným programom ako v úlohe 2. Získané hodnoty absorbancie pre tri prídavky štandardov sú 0,098; 0,121; 0,139. Na základe týchto hodnôt bol zostrojený graf závislosti hodnôt nameranej absorbancie od koncentracii štandardu Cr pre neznámu vzorku bez prídavku štandardu a tri prídavky štandardu k neznámej vzorke.



Obrázok 6. Graf závislosti absorbancie od koncentrácie Cr v neznámej vzorke bez prídavku štandardu a troch prídavkov štandardu k neznámej vzorke.

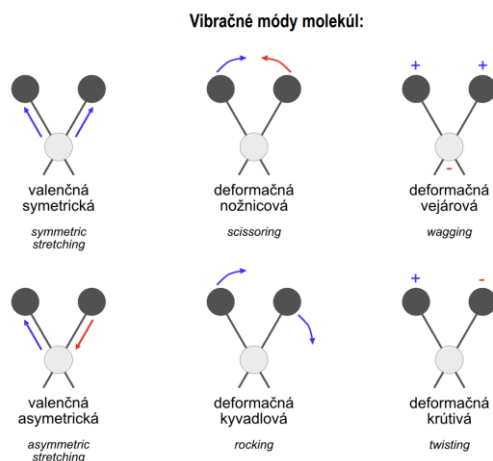
- a) Vypočítajte koncentráciu Cr prítomného v neznámej vzorke vody metódou prídavku štandardu graficky, pričom využite lineárnu rovnicu z obrázku 6. Výsledok vyjadrite v jednotkách $\mu\text{g dm}^{-3}$.
- b) Vypočítajte koncentráciu Cr v neznámej vzorke metódou prídavku štandardu výpočtom. Výsledok uveďte ako aritmetický priemer Cr v neznámej vzorke z troch prídavkov roztoku štandardu Cr k neznámej vzorke a výsledok vyjadrite v jednotkách $\mu\text{g dm}^{-3}$.
- c) Aká je absolútna a relatívna chyba stanovenia Cr v neznámej vzorke vody, ak nezávislou metódou bol stanovený skutočný obsah Cr vo vzorke na $6,15 \mu\text{g dm}^{-3}$. Výpočty uskutočnite pre metódu kalibračnej krivky aj pre metódu prídavku štandardu graficky a výpočtom.
- d) Posúďte, ktorá z troch uvedených metód vyhodnotenia na stanovenie Cr v neznámej vzorke vody metódou ETAAS dosahuje najmenšie chyby stanovenia.

Pozitívne vibrácie

Jakub Orság (orsag13@uniba.sk)

Mikrovlnná rúra ohrieva vaše jedlá tým, že molekuly (hlavne voda) začnú vibrovať a rotovať čím sa zvýši ich teplota a my si môžeme užít tú pizzu z minulého večera. Vibrácie molekúl vieme využiť nielen na ohrievanie jedla, ale aj vo vede, napríklad pri organickej syntéze je niekedy nutné zohriať reakčnú zmes a k moderným metódam patrí aj využívanie mikrovlnného žiarenia. Taktiež poznáme **infračervenú spektroskopiu** a **vibračné spektrá**, ktoré nám pomáhajú určiť štruktúru látky alebo lepšie preskúmať väzby v molekule.

Vibrácie molekúl vieme skúmať pomocou infračervenej (IČ) spektroskopie. Sledovanie vibrácií molekúl je založené na absorpcii infračervenej časti spektra elektromagnetického žiarenia o vlnových dĺžkach v rozmedzí 10 μm - 1 mm. Každá väzba alebo funkčná skupina absorbuje infračervené žiarenie len pri určitej charakteristickej vlnovej dĺžke, ktorá vyvolá jej vibračný prechod - rozkmitanie. Frekvencia vibrácií (vlnôčet) sa neuvádza v nanometroch ako pri iných spektroskopiách ale v recipročných centimetroch (cm^{-1}). Následne vieme tieto vibrácie kategorizovať, **valenčné vibrácie** menia dĺžku väzby a **deformačné vibrácie** uhol väzby.



Obrázok 1. Vibračné módy molekúl.

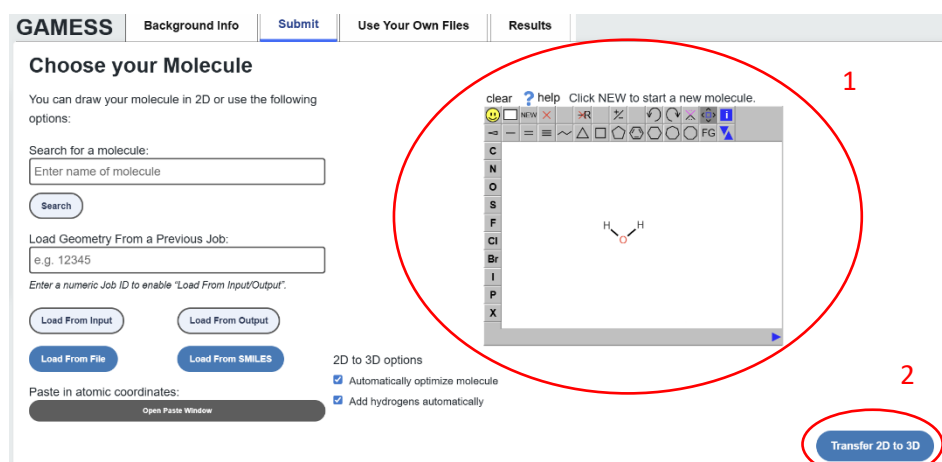
Kmitanie molekúl vieme prirovnáť k harmonickému oscilátoru (pružina alebo kyvadlo). Toto je pravdaže len aproximácia a reálne výpočty nepoužívajú toto zjednodušenie, ale vieme si na tom ukázať zopár korelácií. Pre nás najdôležitejšou hodnotou je frekvencia oscilácie. Tá sa pre pružinu vyjadruje ako $f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$. Dôležitými členom je priamo úmerná konštanta

pružnosti/sila pružiny “ k ” ktorú vieme prirovnať k sile väzby a nepriamo úmerná hmotnosť “ m ”.

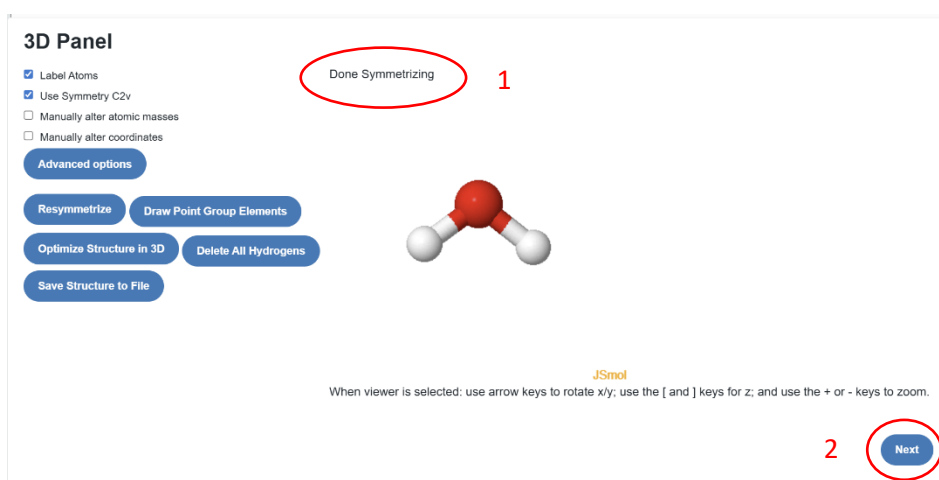
Úloha č. 1 V prvej úlohe sa oboznámime s výpočtami IČ spektier, konkrétne si ukážeme výpočet pre vodu. V prehliadači si otvoríme link: <https://chemcompute.org/gamess/submit>.

V editorovom okienku nakreslíme molekulu vody. Horný panel nám umožňuje kresliť väzby a bočným nahrádzame atómy v štruktúre. Ak necháte atóm neoznačený (nebude mu prislúchať žiadne písmenko) program predpokladá že sa jedná o uhlík. Takisto kreslenie všetkých vodíkov nie je nutné, ak máte zakliknuté políčko „*add hydrogens automatically*“.

Ak sa vám podarilo nakresliť molekulu vody klikneme na tlačítko vpravo dole „*Transfer 2D to 3D*“ čím z 2D štruktúry program vytvorí 3D predoptimalizovanú molekulu.



Počkáme kým sa nám v okne zobrazí „*Done Symmetrizing*“ a klikneme na „*Next*“. Tu si tiež vieme overiť správnosť štruktúry.



Posledným krokom sú inštrukcie na výpočet. Zadáajte inštrukcie podľa obrázku. Najdôležitejšie je nezabudnúť pridať „IR“ keďže chceme počítať IČ spektrá a „Geometry Optimization“. Taktiež pre istotu skontrolujeme bazu a funkcionál výpočtu, mali by byť nastavené na „6-31G**“ a „B3LYP“. Následne klikneme na „Submit Job“.

Set Parameters for Quantum Mechanical Calculation

Select your package: ☒ GAMESS ☐ Par1

Name for input file: e.g. H2_Par1

Comment: Optional note

Charge: 0

Multiplicity: 1

Type: ☐ Single Point Energy ☒ **Geometry Optimization** ☐ Saddle Point Search

Add-Ons: ☒ **IR** ☐ Thermodynamics ☐ UV-Vis ☐ NMR ☐ Raman ☐ AH (g3mp2) ☐ NBO (dft-tpmp) ☐ None

Basis Set: ☐ AM1 ☐ PM3 ☐ PM6 ☐ STO-3G ☐ 3-21G ☒ **6-31G**** ☐ 6-311G** ☐ 6-311+G** ☐ aug cc-pVDZ ☐ SPK DZP

Molecular Orbital Method: ☒ **RHF** ☐ ROHF ☐ UHF

DFT Functional: ☐ None ☒ **B3LYP** ☐ PBE0 ☐ M06 ☐ wB97X-D

PCM Solvent: ☒ None ☐ Water ☐ Methanol ☐ Ethanol ☐ Acetone ☐ THF

Computer Cluster: ☐ auto ☒ jetstream2 (0.0 min queue)

Processor Cores: 1

Memory (Optional): 2 GB

Time Limit: 1 hour

Project: -- No Project --

Submit Job

Program následne začne optimalizovať geometriu molekuly a počítať IČ spektrum. Počkáme kým sa na obrazovke nezobrazí „Job XXXXXXXX Success“ (môže to trvať aj zopár minút), vtedy sa výpočet dokončil úspešne. Vibrácie molekuly vieme zobraziť kliknutím na danú vibráciu v okienku „Vibrations cm^{-1} “. Relevantné sú len vibrácie, ktoré majú hodnotu intenzity „Inten.“. Pokiaľ vlnочet nemá vypísanú intenzitu, o takejto vibrácii neuvažujeme.

GAMESS Background Info Submit Use Your Own Files Results

Job Number: 1455801 **Get Job** Choose file to download: Gamess.stdout Download

Summary Real Time Output Input File Output File

Job 1455801 (Jetstream2) Success

unknown GEOMETRIC + RESSTAN 6-31G** B3LYP RHF Neutral singlet

EXECUTION OF GAMESS TERMINATED NORMALLY Sat Jan 3 13:40:18 2026

TOTAL CPU TIME = 12.9 (0.2 MIN)

TOTAL WALL CLOCK TIME= 14.4 SECONDS, CPU UTILIZATION IS 89.53%

Wait for the gears to stop spinning at the bottom. Please save your output file instead of opening it.

Energy Units: a.u.

☐ Label Atoms ☐ Label Partial Charges

Electronic Energy = -76.3718 a.u.

Visualizations

Orbitals a.u.

#	Energy	Sym
15	1.7500	A1
14	1.7326	A1
13	1.1968	A1
12	1.0660	A1
11	0.8964	A1
10	0.8942	D2
9	0.8842	A1
8	0.7757	A1
7	0.1512	B1
6	0.0656	A1
5	-0.2677	R2

Vibrations cm^{-1}

#	Freq.	Inten.
1	45.24	-
2	35.74	-
3	27.63	-
4	0.01	-
5	0.07	-
6	0.21	-
7	1712.26	75.61
8	3725.4	1.64
9	3847.23	19.12

Do More Calculations:

3D Model:

When viewer is selected: use arrow keys to rotate x/y; use [] for z; and +/- to zoom.

Show Coordinates

Vyskúšajme si priradiť a zobrazit' vibrácie vody. Kliknutím na vibráciu pri cca. 1712 cm^{-1} by ste mali vidieť deformačnú nožnicovú vibráciu (animácia molekuly vľavo), 3725 cm^{-1} valenčnú symetrickú a 3847 cm^{-1} valenčnú asymetrickú. Vaším výstupom tejto úlohy bude vypočítať pomocou rovnakého postupu IČ spektrum oxidu uhličitého a vypísať vlnočty dvoch najintenzívnejších vibrácií. Hodnoty vlnočtov zaokrúhlite na celé čísla.

	Frekvencia [cm^{-1}]	Intenzita
1.		
2.		

Úloha č. 2 Vypočítajte vibračné spektrá nasledovných látok (rovnakým postupom ako v úlohe 1) a napíšte pri akej frekvencii sa vyskytovali dané vibrácie funkčných skupín. Na priradenie typu vibrácie použite obrázok 1. alebo na linku https://sk.wikipedia.org/wiki/Infračervená_spektroskopia nájdete aj animácie vibrácií. Výsledky zapíšte do tabuľky, hodnoty vlnočtov zaokrúhlite na celé čísla.

Formaldehyd	Frekvencia [cm^{-1}]
Valenčná symetrická CH_2	
Deformačná nožnicová CH_2	
Deformačná kyvadlová CH_2	
Deformačná vejárová CH_2	
Valenčná vibrácia C=O	

Metanol	Frekvencia [cm^{-1}]
Valenčná asymetrická CH_2	
Valenčná vibrácia O-H	
Deformačná vejárová CH_3	
Deformačná nožnicová CH_2	
Valenčná vibrácia C-O	

Metylamín	Frekvencia [cm^{-1}]
Valenčná asymetrická CH_2	
Valenčná symetrická NH_2	

Deformačná kyvadlová CH ₂	
Deformačná nožnicová NH ₂	
Valenčná asymetrická NH ₂	

Úloha č. 3 Zorad'te zlúčeniny (**acetón, acetaldehyd, dimetylacetamid, acetylchlorid, metylacetát a butenón** (metylvinyľketón)) podľa rastúcej sily väzby C=O pomocou vľnočtu ich vibrácie. Vypočítajte IČ spektrá pre dané molekuly, nájdite vibráciu C=O väzby a na základe vyššie uvedenej rovnice usporiadajte molekuly od najsilnejšej k najslabšej C=O väzbe. Okrem zoradenia látok vypíšte aj vibrácie všetkých C=O väzieb.

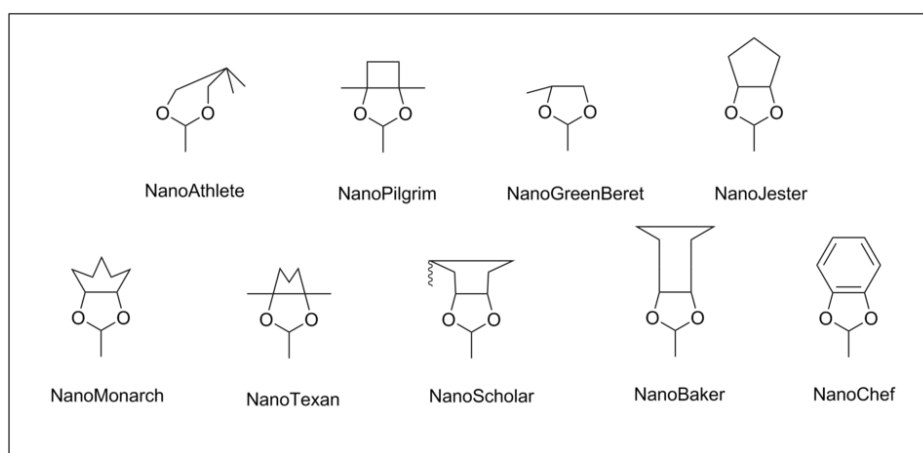
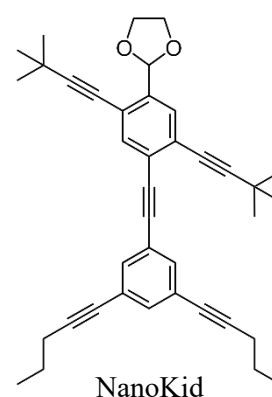
	Látka	Frekvencia [cm ⁻¹]
1.		
2.		
3.		
4.		
5.		
6.		

Molekulové absurdity

Peter Dudáš (dudas36@uniba.sk), Filip Holec, Eva Žilková

Každý z nás to pozná. *Scroll*-ujeme si tak Instagram, keď v tom sa nám objaví memečko s tou najabsurdnejšou molekulou mesiaca. Prvotná myšlienka nám hovorí, že to určite nie je možné, a pokračujeme v *scroll*-ovaní ďalej. Čo ak ale niektoré skutočné sú? Na túto otázku si budeme odpovedať počas celej tejto úlohy.

Medzi prvé molekuly, na ktoré sa spolu pozrieme, sú **nanoputiani**. Tieto malé molekuly boli prvýkrát syntetizované v roku 2003 vo výskumnej skupine Jamesa Toura ako pomôcka pri zvýšení záujmu mládeže o prírodné vedy, prevažne chémiu. Tieto molekuly sa vyznačujú výraznou stabilitou, pričom ich príprava nie je až tak náročná a dajú sa pripraviť vo vysokých výt'azkoch. Špeciálnou charakteristikou týchto molekul je ich „profesionalita“. V závislosti od tvaru „hlavičky“ rozlišujeme niekoľko povolání, ktorým sa nanoputiani môžu venovať.



Obrázok 1. Hlavičky nanoputianov znázorňujúce rôzne profesie.

To, že niektoré profesie porušujú väzbové uhly a dĺžky pre dnešok zanedbáme a sústredíme sa čisto iba na molekuly, z ktorých sú vytvárané.

Úloha č. 1 Nakreslite aspoň tri východiskové dioly, z ktorých jednotlivé povolania, uvedené vyššie, vytvoríte a uveďte ich správny názov.

Úloha č. 2 Navrhните aspoň 3 dioly, z ktorých budete schopný pripraviť hlavičku nanoputiana s novou profesiou a tú následne pomenujte.

Syntéza už predstaveného nanoputiana je relatívne jednoduchá, pričom sa začína z 1,4-dibrómbenzénu (horná časť) a 4-nitroanilínu (dolná časť).

Úloha č. 3 Navrhните jednoduché syntézy prípravy východiskových látok, spomínaných vyššie, pre syntézu nanoputianov, s tým, že pri syntéze budete vychádzať z čistého benzénu.

Celková syntéza nanoputianov vyzerá nasledovne.

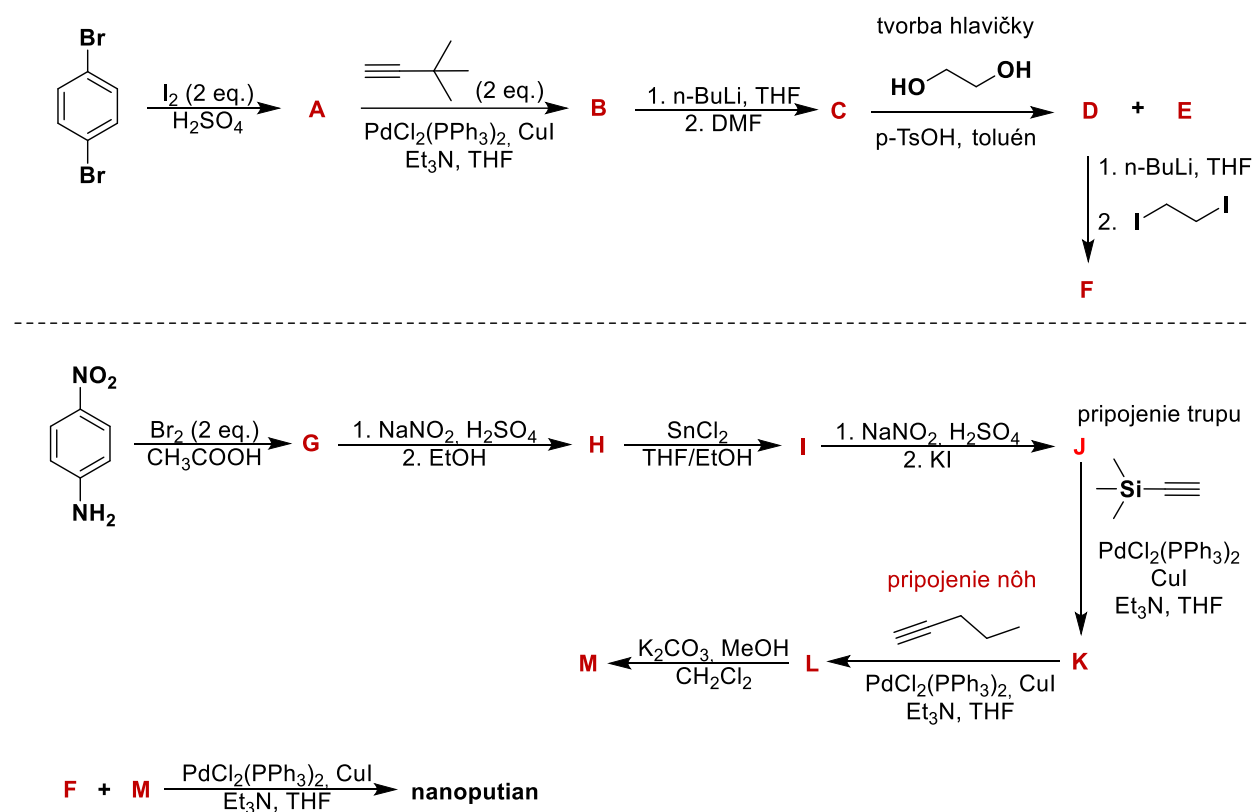


Schéma 1. Syntéza nanoputianov.

Úloha č. 4 Vyriešte štruktúry produktov **A-M**, pričom viete, že reakcie katalyzované paládiom predstavujú kaplingové reakcie, kde sa tvorí nová C-C väzba.

Pokiaľ by sme pri tvorbe rúk nepoužili 3,3-dimetylbutín ale but-3-ín-1-ol, dokázali by sme takto pospájať nanoputianov do „tancujúcich“ párov alebo až do dlhých reťazí, podľa nasledovnej schémy. Nanoputiani A a B sú ľubovoľní z ponúknutých povolaní.

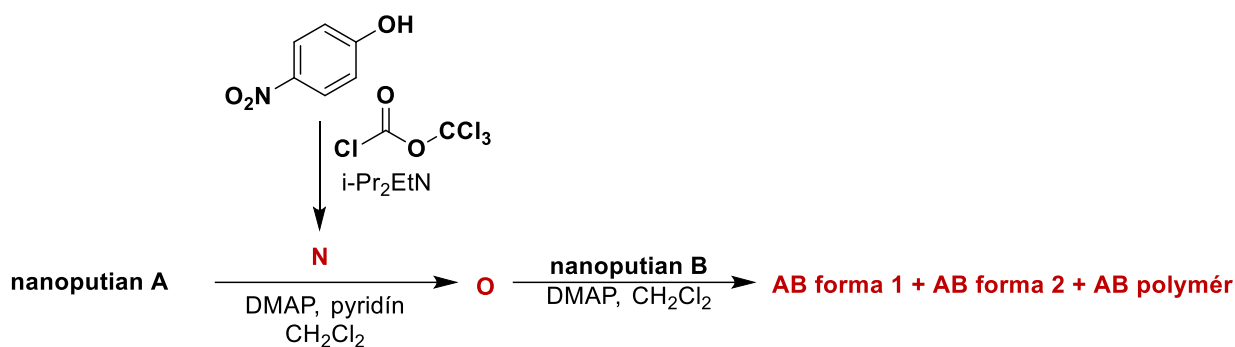
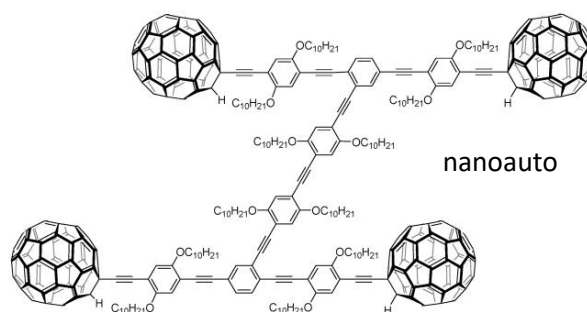


Schéma 2. Syntéza tancujúcich nanoputiánov.

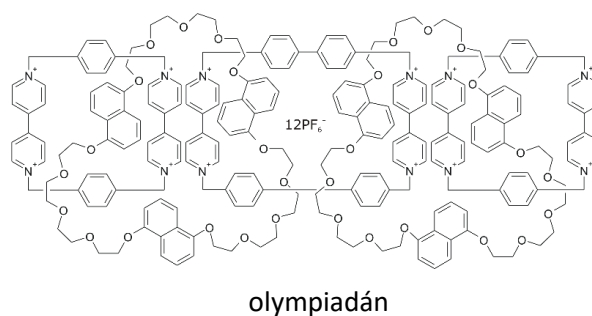
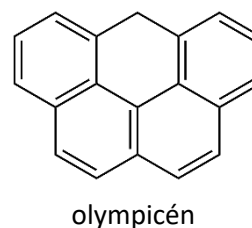
Úloha č. 5 Vyriešte štruktúru činidla **N**, produktu **O** a štruktúry tancujúcich foriem **1** a **2** a aj všeobecný vzorec pre **polymér**.

Vo výskumnej skupine Jamesa Toura vznikla aj ďalšia zaujímavá molekula, a to **nanoauto**. Aj napriek tomu, že názov napovedá tomu, že daná molekula by sa mala „pohybovať“ bola syntetizovaná s iným zámerom. Jej úlohou bolo dokázať a potvrdiť, ako sa fullerény pohybujú po kovových povrchoch. Na základe nimi vykonaných experimentov bolo dokázané, že fullerény sa po kovoch otáčajú, teda rotujú, a nie súchajú, ako si vedci mysleli.

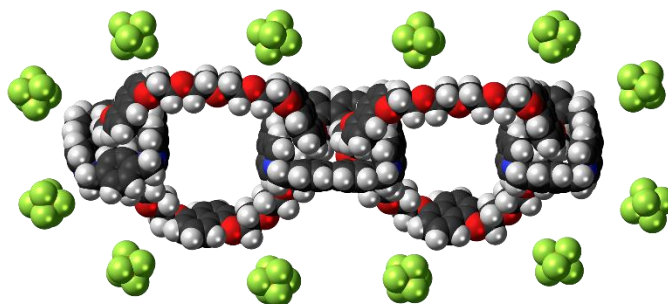


Úloha č. 6 V štruktúre vyššie nakresleného nanoauta sú ako kolesá použité fullerény C₆₀. Navrhните ešte aspoň 2 možné existujúce veľkosti kolies takým spôsobom, aby po ich použití vyzerali molekulové vozidlá ako skutočné vozidlá. Pre zjednodušenie môžete uvádzať len jednu stranu „vozidla“.

Medzi ďalšie molekuly pripravené pre špeciálne príležitosti patria cyklické molekuly reprezentujúce olympijské kruhy. Poznáme 2 takéto molekuly, a to **olympicén** a **olympiadán**. Zatiaľ čo olympicén bol pripravený v roku 2010 Grahamom Richardsom a Anthonym Williamsom ako pocta a oslava olympijských hier v roku 2012, ktoré sa práve konali v Londýne, olympiadán bol pripravený už v roku 1994 Fraserom Stoddartom. Olympiadán ešte lepšie reprezentuje prepletené olympijské



kruhy a patrí do skupiny látok s názvom katenány. Sú to látky, ktoré sa vyznačujú tým, že ide o okolo seba prepletené kruhy, a ich rozmotanie je možné iba porušením niektorej z väzieb. I keď ani jedna z molekúl zatiaľ nenašla praktické využitie, molekuly na báze katenánov nachádzajú uplatnenie ako molekulárne počítače.



Úloha č. 7 Navrhnete syntézu olympicénu.

Chemik Samo pri riešení týchto úloh príliš vyhladol a napadlo mu, že by si dal poriadnu praženicu z 4 vajec, s opraženou cibulčkou a slaninkou. Popri jedení sa zamýšľal nad tým, či existujú aj nejaké „molekulové zvieratá“. Jediné zviera, ktoré mu napadlo je, príhodne, prasiatko a túto molekulu nazval porkán. Táto molekula však v sebe nesie jeden vážny problém.



Úloha č. 8 Nakreslite molekulu porkánu a **opíšte**, o aký problém sa jedná. ([nadhernl/porkan](https://nadhernl.com/porkan)) Nakoľko by Samo však rád pripravil aj ďalšie zvieratká, aby zaplnil svoju chemickú zoo, vás žiada, aby ste navrhli aspoň **3 zvieratá**, prípadne aj ich syntézu, ktoré bude možné vidieť v expozícii počas letných mesiacov, kedy je zoo prístupná návštevníkom (pre potreby tejto úlohy môžete zanedbávať väzbovosť uhlíka aj väzbové uhly).

BONUS. Napíšte recenziu tejto úlohy.

Pozn. autorov: Prosím riešenie úloh odovzdávajte ako 1 súbor.