

N-trophy³

Řešení úlohy 4: CHEMIE

Tým JuTeJa
Gymnázium, Brno, Vídeňská 47
Jan Horáček; jan.horacek@seznam.cz
Tereza Kadlecová; berunda.kadlecova@seznam.cz
Julie Přikrylová; jul.ca@centrum.cz

1. února 2013

1 Úvod

Teoretická a jednoznačně velmi zásludná kvalifikace na N-trophy³.

Na počátku byl úvodní text, který na svůj značný rozsah neobsahoval až tolik reálně využitelných informací, alespoň zdánlivě.

2 Analýza zadání

Ze zadání přímo vyplývají tyto klíčové informace:

- Mezi protokoly se nachází alespoň jeden vzorek, který odpovídá hledané látce.
- Hledaná látka má rudou barvu.
- Hledaná látka je organického původu.
- Hledaná látka se vyskytuje v Amazonii a byla získána extrakcí z neznámé rostliny.

Nepřímo pak z grafu vyplývá důležitá věc:

- Hledaná látka skutečně existuje.

Toto jsme odvodili na základě poměrně realisticky vypadajících měření a na základě faktu, že porota musí být schopna posoudit správnost řešení.

3 Postup řešení

3.1 Absorpční spektrum

Na základě informace, že je látka X rudá, jsme se snažili z měření absorpčních spekter získat barvu vzorků.

Jelikož je emisní spektrum definováno jako inverzní funkce k absorpčnímu spektru, tak jsme se pokusili vyjádřit barvy jednotlivých vzorků.

Na první pohled do spekter je zřejmé, že vzorek 001 rozhodně nemá červenou barvu. To lze dokázat tak, že vzorek 001 pohlcuje velké množství červené barvy (625 - 740 nm) a tím pádem emituje minimální množství světla nám jevícího se jako červené/rudé. **Látka 001 tedy rozhodně není rudá.**

U zbylých dvou látek se nám ovšem nedařilo jednoznačně specifikovat jejich přesnou barvu. Hledali jsme algoritmy převodu spekter do RGB, avšak tento postup se ukázal být poměrně náročným. Převodili jsme tedy barvy hrubým odhadem do RGB a výsledkem bylo, že 003 byla fialová a 002 oranžová. Toto měření nás neuspokojilo a také nám připadalo divné, že by bylo možné vyvodit výsledek pouze na základě absorpčních spekter. Bylo tedy zapotřebí využít dalších vlastností.

3.2 Hmotnostní spektrometrie

Využití výsledků hmotnostní (MS) spektrometrie spočívá v získání molekulární hmotnosti analyzované látky. Hmotnost molekuly m_0 zjistíme na základě vztahu $m_0 = x_{peak}$.

x_{peak} v tomto případě vyjadřuje x souřadnici nejvyššího peaku v grafu hmotností spektrometrie.

3.3 Prvkové složení

Po krátkém studiu prvkové analýzy se nám zdály poměry prvků poněkud divné. Zejména pak minimální množství vodíku, který je, spolu s uhlíkem, základním stavebním prvkem organických sloučenin.

Vysvětlení tohoto jevu jsme našli poté, co jsme si uvědomili, že se nejedná o množství zastoupení prvků (jako je tomu např. v sumárním vzorci), ale o hmotnostní zastoupení prvků.

V první fázi zjistíme absolutní hmotnost jednotlivých prvků (v Da , resp. násobcích m_u): **1.**

$$m_{prvek} = m\%_{prvek} * m_0 \quad (1)$$

Po získání absolutních hmotností všech prvků přejdeme k výpočtu sumárního zastoupení jednotlivých prvků v dané sloučenině: **2.**

$$n_{prvek} = \frac{m_{prvek}}{A_{r_{prvek}}} \quad (2)$$

Výsledné hodnoty přehledně zobrazují následující tabulky:

Vzorek 002			
Hmotnost molekuly (m_0) [Da]:			350
prvek	m/%	m/Da	n
C	54.86	192.01	16
H	3.16	11.06	11
O	18.27	63.95	4
N	8.00	28.00	2
S	9.15	32.03	1
Na	6.56	22.96	1

Vzorek 003			
Hmotnost molekuly (m_0) [Da]:			492
prvek	m/%	m/Da	n
C	53.66	264.01	22
H	4.09	20.12	20
O	42.24	207.82	13

Výstupem celého výpočtu je n , které odpovídá počtu atomů daného prvku ve zkoumané molekule.

3.4 Sumární vzorce

Z předchozích dat vyplývá, že jsme schopni definovat základní sumární vzorce 2 zkoumaných látek, tedy:

- 002: $C_{16}H_{11}O_4N_2SNa$
- 003: $C_{22}H_{20}O_{13}$

Po vyhledání těchto sloučenin jsme zjistili, že obě skutečně existují, jsou to barviva a jedna sloučenina je dokonce rudá:

- 002: Orange II. (oranžová II.), neboli C.I. ACID ORANGE 7 [1]
- 003: Carminic acid (kyselina karmínová) [2]

Vzhledem k základnímu požadavku, tedy barvě, již můžeme s přehledem říci, že **látkou X je vzorek 003: Carminic acid**, neboli kyselina karmínová.

3.5 Kyselina karmínová

Zajímavé na kyselině karmínové je to, že se vyskytuje na hmyzu Cochineal [3], který žije ve Střední Americe (Amazonii) a za svého života využívá specifický kaktus, na který naklade svá vejce. Tato vejce mají ten zvláštní znak, že jsou rudá. Že by byl náš extrakt právě z jednoho z těchto kaktusů? Až podezřelá shoda, že?

4 Pro a proti výsledku

Před závěrem bychom rádi shrnuli kompletní výčet argumentů pro a proti sloučenině 003:

Argumenty pro:

1. Látka je rudá.
2. Látka je organická.
3. Látka se vyskytuje ve Střední Americe (Amazonii).
4. Vypočítaná molekulární hmotnost odpovídá tabulkové molekulární hmotnosti (viz [2]).
5. Látka je možné najít na rostlinách.
6. Při hledání látky X jsme využili téměř všechna poskytovaná data.

Argumenty proti:

1. Vzorek 002 může nabývat zbarvení až do červena.

5 Závěr

Typická úloha, ve které šlo o to mít nápad a dokázat ho správně použít. Úlohu hodnotíme jako složitější, ale o to větší byl úspěch při slovech "hele, ta kyselina je červená."

Poděkování

- Ing. Jiřímu Bilíkovi za přednášku 'MS/MS spektrometrie'

Reference

- [1] www.chemicalland21.com *C.I. ACID ORANGE 7*
<http://www.chemicalland21.com/specialtychem/finechem/ORANGE%20II.htm>
- [2] Wikipedia *Carminic Acid*
http://en.wikipedia.org/wiki/Carminic_acid
- [3] Wikipedia *Cochineal*
<http://en.wikipedia.org/wiki/Cochineal>