

Játékszabályok

- Ne felejtse el felírni a nevedet és kódodat minden lap tetejére!
- 5 órád van a feladatok megoldására. Csak a START utasítás elhangzása után kezdheted el dolgozni!
- Csak a kapott számológépet használhatod!
- Minden eredményt a kijelölt keretbe írd! Ami ezen kívül van, azt nagyra értékeljük, de... Használd a hátlapokat, ha piszkozatpapírra van szükséged!
- Írd le a szükséges számításokat a megfelelő keretbe, amikor szükséges! Ha csak a helyes végeredményt írod le egy összetettebb számolásnál, nem kapsz pontot!
- **A számszerű eredmények értelmetlenek a megfelelő mértékegység nélkül. Nagyon meg leszsz büntetve, ha a szükséges helyeken nem írod ki a mértékegységet!** Ezen kívül a válaszokban megadandó számok értékes jegyeit is a megfelelő körültekintéssel kezeld!
- Minden gázt vegyél ideálisnak!
- Amikor elhangzik a STOP utasítás, azonnal hagyd abba a munkát! Ha késlekedsz, érvényteleníthetik a dolgozatodat!
- Amikor befejezted a dolgozatot, tedd a papírjaidat a borítékba! Ne ragaszd le a borítékot!
- Várj addig, amíg a felügyelő meg nem engedi, hogy elmenj!
- Ez a dolgozat **42** oldalas.
- A haailotvs agnol veiórzt báikmorr ekelhertéd a veersny sáorn, ha érgellemnesetétt fdínoortttuk



Fizikai állandók

Név	Jel	Érték
Avogadro-állandó	N_A	$6,0221 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Boltzmann-állandó	k_B	$1,3807 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Univerzális gázállandó	R	$8,3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
Faraday-állandó	F	96485 C mol^{-1}
Fénysebesség	c	$2,9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Planck-állandó	h	$6,6261 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Standard nyomás	p°	10^5 Pa
Légköri nyomás	p_{atm}	$1,01325 \times 10^5 \text{ Pa}$
A Celsius skála nullapontja		$273,15 \text{ K}$
Nehézségi gyorsulás	g	$9,807 \text{ m s}^{-2}$
Bohr magneton	μ_B	$9,274015 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$

Hasznos képletek

A kocka térfogata

$$V = l^3$$

A gömb térfogat

$$V = \frac{4}{3} \pi r^3$$

Gravitációs helyzeti energia

$$E = mgh$$

Ideális gáz állapotegyenlet

$$pV = nRT$$

Arrhenius-egyenlet

$$k = A \exp(-E_a / RT)$$

Effektív mágneses momentum

$$\mu_{\text{eff}} = \sqrt{n(n+2)} \text{ Bohr magneton}$$



Periódusos rendszer relatív atomtömegekkel

1																		18	
1 H 1.008																	2 He 4.003		
3 Li 6.94	4 Be 9.01											5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18		
11 Na 22.99	12 Mg 24.31											13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95		
19 K 39.102	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.90	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.71	29 Cu 63.55	30 Zn 65.37	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80		
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.40	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30		
55 Cs 132.91	56 Ba 137.34	57 La* 138.91	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.09	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po	85 At	86 Rn		
87 Fr	88 Ra	89 Ac ⁺																	

*Lanthanides	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm	62 Sm 150.4	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97
+Actinides	90 Th 232.01	91 Pa	92 U 238.03	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



1. feladat

az egész 10%-a

Az Avogadro-állandó becslése

1a	1b	1c	1d	1e	1f	1g	1h	1i	1j	1k	Össz.
4	4	4	2	1	2	3	6	4	3	3	36

Több különböző módszert használnak az Avogadro-állandó meghatározására. Az alábbiakban három különböző módszert ismertetünk.

„A” módszer (modern) – röntgendiffrakciós adatok alapján

Az elemi cella a kristályrács legkisebb egysége, amelynek sokszorozásával az egész rács felépíthető. Röntgendiffrakciós vizsgálatok szerint az arany szerkezete lapcentrált köbös (azaz a fématomok a kocka alakú elemi cella csúcsain és minden egyes oldallap közepén helyezkednek el). Az elemi cella oldaléle 0,408 nm hosszú.

- a) Rajzold fel az elemi cellát és számítsd ki, hány Au atom található egy cellában!

Elemi cella:

Az Au atomok száma az elemi cellában:



NÉV:

KÓD: HUN-S

- b) Az arany sűrűsége $1,93 \times 10^4 \text{ kg m}^{-3}$. Számítsd ki az arany köbös elemi cellájának térfogatát és tömegét!

Térfogat:

Tömeg:

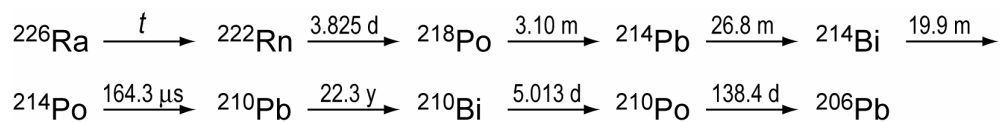
- c) Ebből számítsd ki egy aranyatom tömegét és az Avogadro-állandót! Az Au atom relatív atomtömege 196,97.

Az Au atom tömege:

Avogadro-állandó:

„B” módszer – radioaktív bomlásból (Rutherford, 1911)

A ^{226}Ra radioaktív bomlási sora a következő:



A vázlat a felezési időket tartalmazza, a mértékegységek: y = év, d = nap, m = perc.
Az első bomlás, amelyet t -vel jelöltünk, a többinél sokkal hosszabb felezési idejű.



NÉV:

KÓD: HUN-S

- d) Az alábbi táblázatban jelöld, hogy melyik átalakulás α -bomlás és melyik β -bomlás!

	α -bomlás	β - bomlás
$^{226}\text{Ra} \longrightarrow ^{222}\text{Rn}$		
$^{222}\text{Rn} \longrightarrow ^{218}\text{Po}$		
$^{218}\text{Po} \longrightarrow ^{214}\text{Pb}$		
$^{214}\text{Pb} \longrightarrow ^{214}\text{Bi}$		
$^{214}\text{Bi} \longrightarrow ^{214}\text{Po}$		
$^{214}\text{Po} \longrightarrow ^{210}\text{Pb}$		
$^{210}\text{Pb} \longrightarrow ^{210}\text{Bi}$		
$^{210}\text{Bi} \longrightarrow ^{210}\text{Po}$		
$^{210}\text{Po} \longrightarrow ^{206}\text{Pb}$		

- e) Egy 192 mg ^{226}Ra -ot tartalmazó mintát megtisztítottak és 40 napig állni hagytak. Melyik az az első olyan izotóp (a Ra kivételével), amelyik nem érte el a kvázistacionárius állapotot?

- f) A mintában az α -bomlások teljes sebességét szcintillációs detektorral határozták meg és 27,7 GBq-nek találták (ahol $1 \text{ Bq} = 1 \text{ beütés} \cdot \text{s}^{-1}$). A mintát ezután lezárták 163 napra. Számítsd ki az eközben keletkezett α -részecskék számát!



NÉV:

KÓD: HUN-S

- g) A 163 nap végén az derült ki, hogy a minta 101325 Pa nyomáson és 273 K-en 10,4 mm³ He-ot tartalmaz. Mindezekből számítsd ki az Avogadro-állandót!

- h) A ²²⁶Ra izotóp relatív atomtömege – tömegspektroszkópiás mérések alapján – 226,25. Az Avogadro-állandó irodalmi értékét ($6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$) használva számítsd ki a ²²⁶Ra atomok számát az eredeti mintában (n_{Ra}), a bomlási folyamat sebességi állandóját (λ) és a felezési időt (t , években). Csak az (e) pontban meghatározott izotópig vedd a bomlási folyamatokat számításba!

$n_{\text{Ra}} =$ $\lambda =$

$t =$



„C” módszer – részecskék eloszlása alapján (Perrin, 1909)

Az Avogadro-állandó egyik első pontos meghatározását vízben szuszpendált kolloid részecskék gravitációs térben mutatott függőleges eloszlásának vizsgálatával végezték. Egy ilyen kísérletben $2,12 \times 10^{-7}$ m-es sugarú és $1,206 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ sűrűségű részecskéket szuszpendáltak vízben 15 °C-on. Az eloszlás kialakulása után a térfogategységre jutó részecskék darabszámát számlálták meg az edény aljától számított négy különböző magasságban:

magasság / 10^{-6} m	5	35	65	95
Átlagos részecskeszám egységnyi térfogatban	4,00	1,88	0,90	0,48

- i) A részecskéket gömbnek feltételezve számítsd ki egy részecske tömegét (m); a részecske által kiszorított víz tömegét ($m_{\text{H}_2\text{O}}$); és a részecske ún. effektív tömegét (m^*) (amelybe a víz felhajtóerejét is beleszámítjuk, miközben flóriktanárúr fogja a hasát nevéttében). A víz sűrűségét vedd 999 kg m^{-3} -nek.

$m =$

$m_{\text{H}_2\text{O}} =$

$m^* =$



NÉV:

KÓD: HUN-S

Egyensúlyban az egységnyi térfogatban lévő részecskék száma különböző magasságnál a Boltzmann-eloszlással leírható:

$$\frac{n_h}{n_{h_0}} = \exp\left[-\frac{E_h - E_{h_0}}{RT}\right]$$

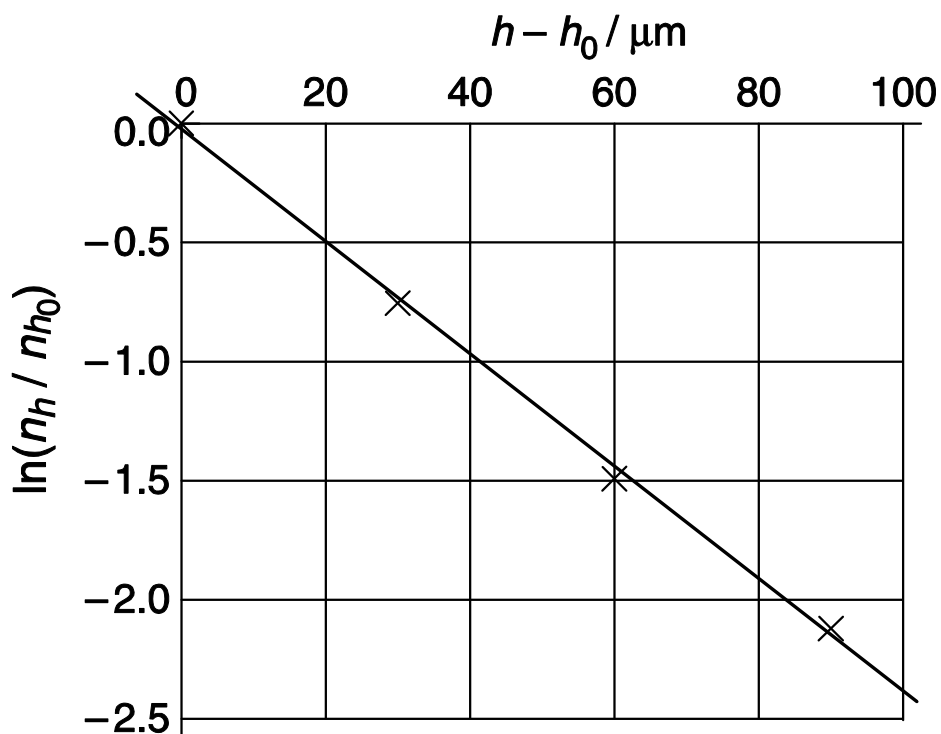
ahol n_h a térfogategységre jutó részecskék száma h magasságban,

n_{h_0} a térfogategységre jutó részecskék száma a h_0 referenciamagasságban,

E_h a részecskéknek az edény alján lévő részecskékhez viszonyított moláris gravitációs helyzeti energiája,

R a gázállandó: $8,3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

A következő grafikonon az előző táblázat adataiból $\ln(n_h / n_{h_0})$ -t ábráztuk ($h - h_0$) függvényében. A referenciamagasság az edény aljától számított $5 \mu\text{m}$ -nél van.





NÉV:

KÓD: HUN-S

j) Vezess le egy képletet az egyenes meredekségére!

k) Számítsd ki ezekből az adatokból az Avogadro-állandót!



2. feladat

az összes 10%-a

H₂ keletkezése a csillagközi térben

2a	2b	2c	2d	2e	2f	2g	2h	2i	Össz
2	2	4	2	6	6	3	2	6	33

Ha két atom ütközik a csillagközi térben, a keletkező molekula energiája olyan nagy, hogy gyorsan disszociál. A hidrogénatomok csak a porrészecskék felületén képeznek H₂-molekulákat. A porrészecskék abszorbeálják a felesleges energiát és a keletkezett H₂-molekula gyorsan deszorbeálódik. A feladatban a H₂ (porrészecskék felületén lejátszódó) keletkezésének két kinetikai modelljét fogod vizsgálni.

A H-atomok porrészecskékre történő adszorpciója mindkét modellben ugyanazzal a sebességi állandóval jellemezhető: $k_a = 1,4 \times 10^{-5} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. A H-atomok darab- vagy részecskesűrűsége (a H-atomok száma egységnyi térfogatban) a csillagközi térben: $[H] = 10 \text{ cm}^{-3}$.

[Megjegyzés: a továbbiakban a felületen megkötött atomok számának, illetve a gázfázisban levő atomok részecskesűrűségének kell megjeleníteniük a sebességi egyenletekben azokon a helyeken, ahol általában koncentrációkat szokás használni. Ennek következményeként a sebességi állandók mértékegységei szokatlanok is lehetnek. A reakciósebesség pl. az időegység alatt képződő atomok/molekulák száma.]

- a) Számítsd ki a H-atomok porrészecskékre történő adszorpciójának sebességét! Ezt az értéket használd a továbbiakban!



NÉV:

KÓD: HUN-S

A H-atomok deszorpciója elsőrendű folyamat az adszorbeált atomok számát tekintve. A deszorpció lépés sebességi állandója: $k_d = 1,9 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

- b) Csak az adszorpciót és deszorpciót figyelembe véve, számítsd ki az egy porrészeecske felületén adszorbeált H-atomok kvázistacionárius számát, N -et!

A H-atomok mozoghatnak a felületen. Amikor találkoznak, H_2 keletkezik, ami aztán deszorbeálódik. A két vizsgált kinetikai modell lényege eltér, de a használt sebességi állandóik megegyeznek (k_a , k_d , és k_r , az adszorpció, a deszorpció és a bimolekuláris folyamatra):

$$k_a = 1,4 \times 10^{-5} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$$

$$k_d = 1,9 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

$$k_r = 5,1 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$$



NÉV:

KÓD: HUN-S

„A” modell:

A H_2 keletkezését másodrendű folyamatnak vesszük. Egy porrészecskén a H-atomok fogyásának sebessége a reakcióban: $k_r N^2$.

- c) Írj fel egy képletet N megváltozásának sebességére, számításba véve az adszorpciót, deszorpciót és a reakciót! Kvázistacionárius állapotot feltételezve határozd meg N értékét!

$N =$

- d) Számítsd ki ezzel a modellel egy porrészecske felületén a H_2 keletkezésének sebességét!

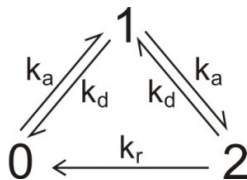


NÉV:

KÓD: HUN-S

„B” modell

A B modell azt próbálja követni, hogy a porrészecskéken 0, 1 vagy 2 H-atom van. A három állapotot a következő ábrán mutatott reakciók kapcsolják össze. A feltételezések szerint egyszerre 2-nél több H atom nincs adszorbeálódva.



x_0 , x_1 és x_2 a három állapotban (0, 1, illetve 2) levő porrészecskék móltörtjei. Ezeket a móltörtöket a továbbiakban koncentrációk gyanánt lehet használni a kinetikai számolásban. Egy m állapotban levő rendszer esetén (móltörtje x_m), a három lehetséges folyamat sebessége:

Adszorpció ($m \rightarrow m + 1$): sebesség = $k_a[H]x_m$

Deszorpció ($m \rightarrow m - 1$): sebesség = $k_d m x_m$

Reakció ($m \rightarrow m - 2$): sebesség = $\frac{1}{2} k_r m(m-1)x_m$

e) Fejezd ki és írd fel a három móltört (x_0 , x_1 and x_2) változásának sebességét (dx_m/dt) !



NÉV:

KÓD: HUN-S

- f) Kvázistacionárius állapotot feltételezve a fenti sebességi egyenletek segítségével fejezd ki és írd fel az x_2/x_1 és x_1/x_0 arányokat! Egyenleteid segítségével add meg az arányok értékét!

- g) Mennyi lesz x_0 , x_1 és x_2 kvázistacionárius állapotban?

[Ha nem lett eredményed az (f) pontban, fejezd ki az eredményt $x_2/x_1 = a$ és $x_1/x_0 = b$ használatával!]



NÉV:

KÓD: HUN-S

- h) Számítsd ki ezzel a modellel egy porrészecske felületén a H_2 keletkezésének sebességét!

- i) Kísérleti adatok nincsenek erre a sebességre, de a legjobb számítógépes szimulációk szerint a sebesség értéke $9,4 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$. Az alábbi állítások melyik modell esetében igazak? Jelöld be az összes igaz lehetőséget!

Állítás	A modell	B modell	Egyik sem
A sebességmeghatározó lépés a H-atomok adszorpciója.			
A sebességmeghatározó lépés a H_2 -molekulák deszorpciója.			
A sebességmeghatározó lépés a H-atomok felületen lejátszódó bimolekulás reakciója.			
A sebességmeghatározó lépés a második H-atom adszorpciója.			
Az az implicit feltételezés, hogy a reakció végbemehet függetlenül az adszorbeált atomok számától, nagy hibát (legalább kettes faktor) okoz.			
Az egy részecskén adszorbeált atomok számának 2-ben való maximálása nagy hibát (legalább kettes faktor) okoz.			



3. feladat

az összes 9%-a

Egy fehérje feltekeredése

3a	3b	3c	3d	3e	3f	3g	3h	Össz
2.5	3.5	1	6	2	4	2	2	23

Sok, kisebb fehérje esetében a letekeredés folyamata leírható a következő egyensúlyi reakcióval:



A feladat szempontjából ezt a folyamatot tekinthetjük egy elemi lépésnek. Az egyensúly helyzete függ a hőmérséklettől. Az ún. olvadási hőmérséklet (T_m) az a hőmérséklet, amelyen a molekulák fele van rendezetlen és fele feltekeredett formában.

A kimotripszin inhibitor 2 (CI2) fehérje 1,0 μM koncentrációjú oldatának fluoreszcenciáját vizsgálták 356 nm hullámhosszon. A fluoreszcencia intenzitását 58 °C és 66 °C között több hőmérsékleten megmérték.

Hőmérséklet /°C	58	60	62	64	66
Fluoreszcencia intenzitás (relatív egység)	27	30	34	37	40

Ha egy ilyen 1,0 μM koncentrációjú oldatban az összes fehérje feltekeredett állapotban van, akkor a fluoreszcencia intenzitása 21 egység 356 nm-en. Ha egy ilyen 1,0 μM koncentrációjú oldatban az összes fehérje rendezetlen formában van, a fluoreszcencia intenzitása 43 egység.



NÉV:

KÓD: HUN-S

- a) Számítsd ki minden hőmérsékleti pontban a rendezetlen állapotban levő molekulák móltörtjét, x -et! Feltételezheted, hogy minden anyag esetében a fluoreszcencia intenzitása egyenesen arányos a koncentrációjával.

Hőm. /°C	58	60	62	64	66
x					

- b) Írj fel egy képletet K -ra, a letekeredés egyensúlyi állandójára x segítségével, és számítsd ki K értékét minden hőmérsékleti pontban!

Hőm. /°C	58	60	62	64	66
K					



NÉV:

KÓD: HUN-S

- c) Becsüld meg a fehérje T_m értékét (1 °C pontossággal)!

$T_m =$

Ha a fehérje letekeredésének reakciójára feltételezhető, hogy ΔH° és ΔS° nem függ a hőmérséklettől, akkor:

$$\ln K = -\frac{\Delta H^\circ}{RT} + C$$

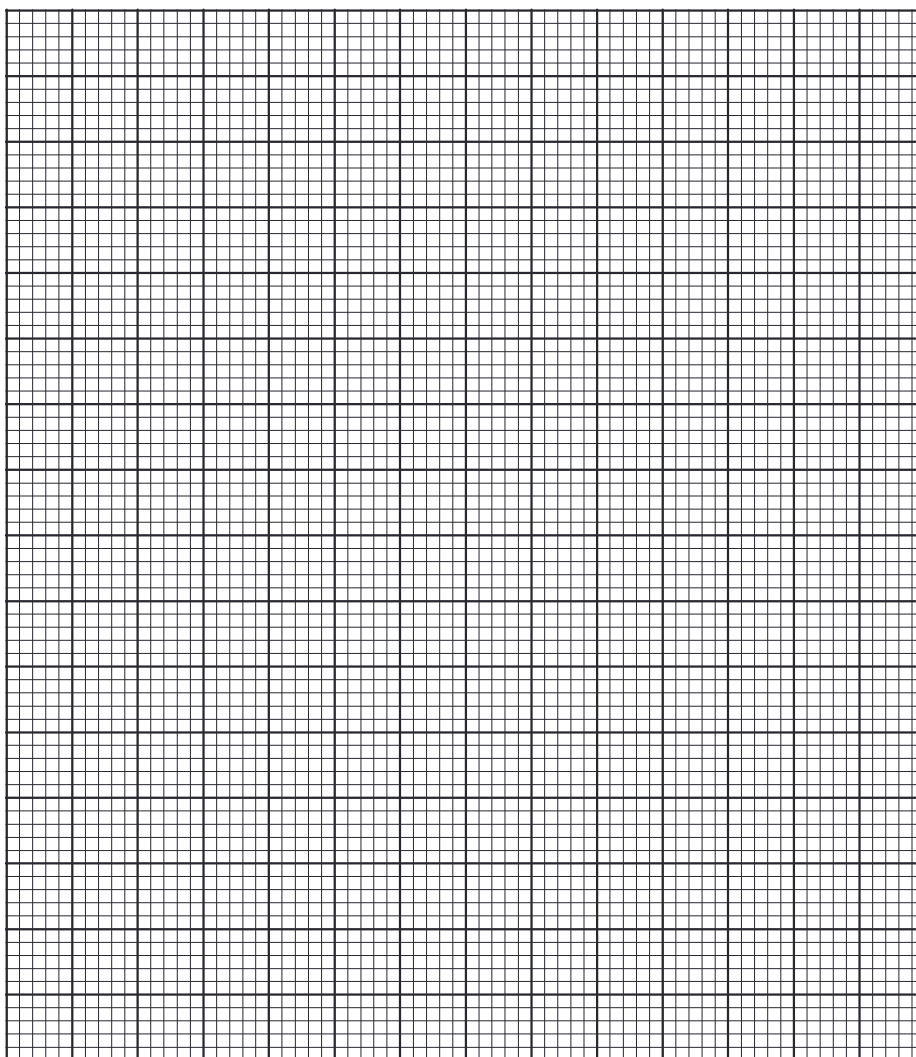
(C egy állandó.)

- d) Készíts egy olyan diagramot, aminek segítségével megállapítható a fehérje letekeredési reakciójának ΔH° és ΔS° értéke! Határozd is meg ezeket!



NÉV:

KÓD: HUN-S



$\Delta H^\circ =$

$\Delta S^\circ =$

Ha nem sikerült ΔH° és ΔS° meghatározása, használd az alábbi, helytelen értékeket!

$\Delta H^\circ = 130 \text{ kJ mol}^{-1}$

$\Delta S^\circ = 250 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$



NÉV:

KÓD: HUN-S

- e) Számítsd ki a letekeredés egyensúlyi állandóját 25 °C-on!

$K =$

Ha nem sikerült K meghatározása, használd a továbbiakban az alábbi, helytelen értéket!

$$K = 3,6 \times 10^{-6}$$

A Cl2 fehérje feltekeredésének elsőrendű sebességi állandója is meghatározható a fluoreszcencia követésével. Egy rendezetlen fehérjét tartalmazó mintában indítják el a feltekeredést (általában az oldat pH-ját változtatják meg). 1,0 μM koncentrációjú letekeredett Cl2 fehérjemintával indítva 25 °C-on így követték a rendezetlen fehérje koncentrációját az oldatban.

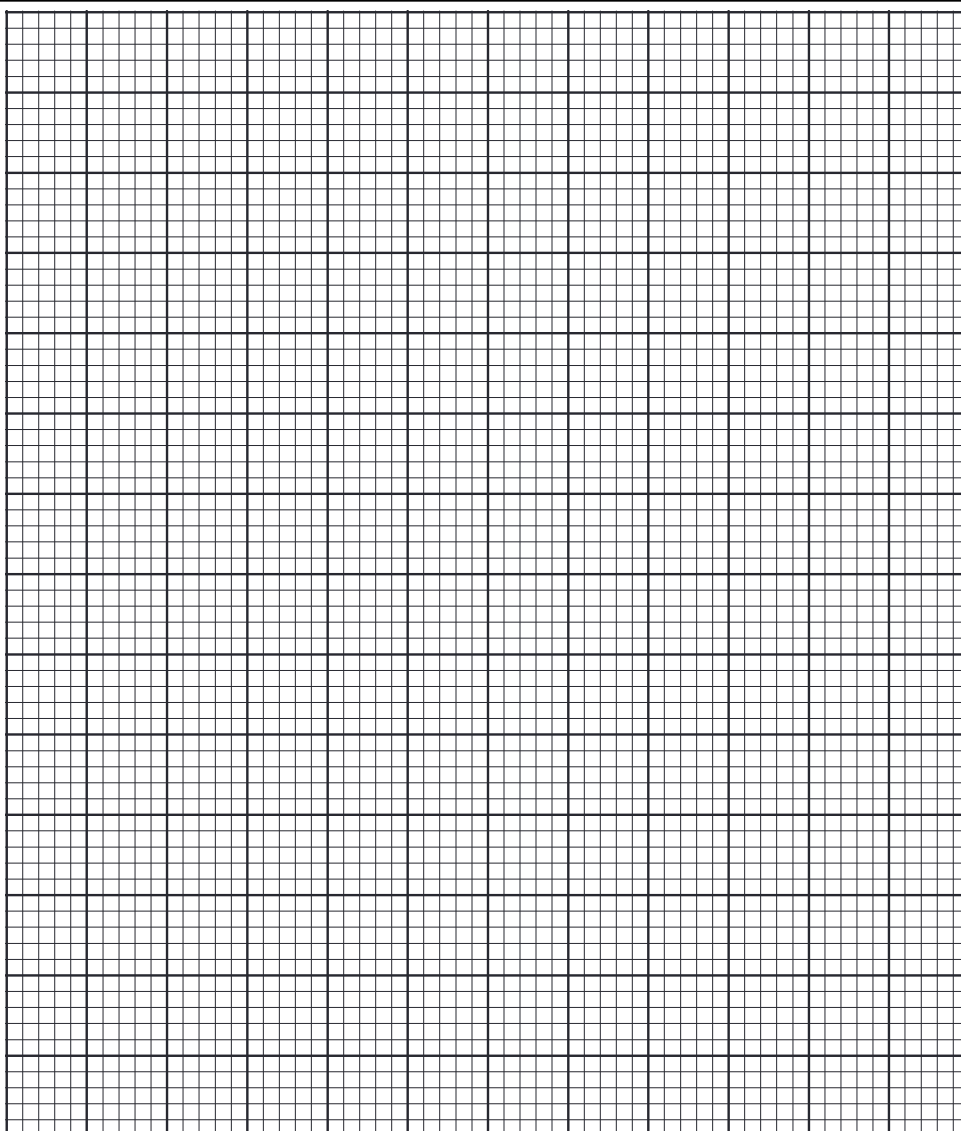
idő / ms	0	10	20	30	40
koncentráció / μM	1	0,64	0,36	0,23	0,14

- f) Készíts egy olyan diagramot, aminek segítségével megállapítható a fehérje feltekeredési reakciójának sebességi állandója, k_f , 25 °C -on! Határozd is meg!



NÉV:

KÓD: HUN-S



$k_f =$

Ha nem sikerült k_f meghatározása, használd a továbbiakban az alábbi, helytelen értéket!

$k_f = 60 \text{ s}^{-1}$.



NÉV:

KÓD: HUN-S

- g) Határozd meg a fehérje *feltekeredésének* sebességi állandóját, k_u -t 25 °C-on!

$k_u =$

- h) 20 °C-on a feltekeredés sebességi állandója 33 s^{-1} . Számítsd ki a fehérje feltekeredési reakciójának aktiválási energiáját!

Aktiválási energia =



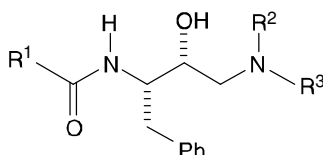
4. feladat

az egész 9%-a

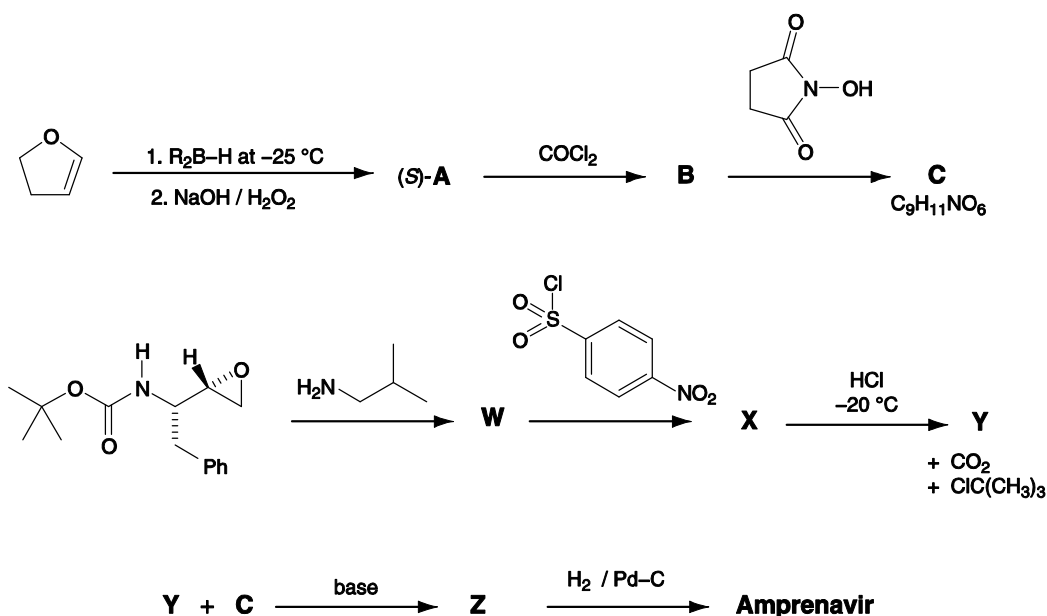
Az Amprenavir előállítása

4a A	4a B	4a C	4a W	4a X	4a Y	4a Z	4b	Össz.
4	3	2	3	3	2	3	3	23

A HIV-ellenes szerek egyik osztálya az ún. proteáz inhibitorok. Úgy hatnak, hogy gátolják egy olyan enzim aktív centrumát, ami a vírusrészecskék összeállításában játszik szerepet. Két sikeres gyógyszer, a *saquinavir* és az *amprenavir* is az alábbi szerkezeti elemet tartalmazza, ami az enzimben lejátszódó folyamat átmeneti állapotát utánozza. R^1 , R^2 és R^3 a hidrogéneken kívül bármilyen atom vagy csoport lehet.



Az *Amprenavir* előállítása az alábbi séma szerint történhet.



Az első lépésben használt R_2B-H királis. Az **A** terméknek az (*S*)-enantiomere keletkezik. (base = bázis)

Az *Amprenavir* 1H NMR spektrumában 3 jel tűnik el ha a mintát D_2O -val összerázzuk: δ 4,2 (2H), δ 4,9 (1H) és δ 5,1 (1H).



NÉV:

KÓD: HUN-S

Javasolj szerkezetet az intermedierekre: **A, B, C, W, X, Y** és **Z**, és az *Amprenavir*re!
A válaszaidon világosan látszódjon az egyes sztereocentrumok térszerkezete!

A	B
----------	----------

C

W



NÉV:

KÓD: HUN-S

X

Y

Z



NÉV:

KÓD: HUN-S

Amprenavir



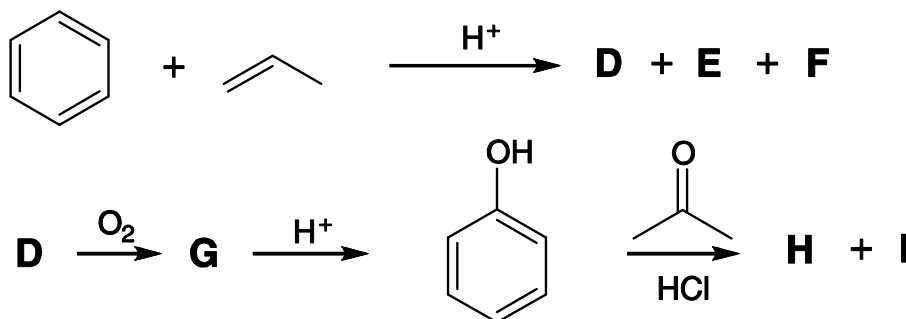
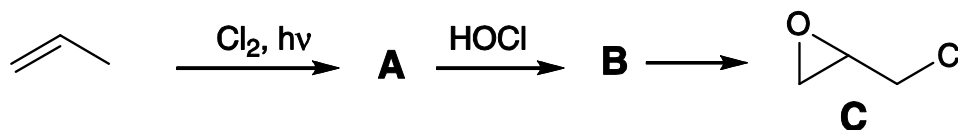
5. feladat

az egész 10%-a

Epoxigyanta

5a A	5a B	5b	5c D	5c E	5c F	5d G	5e H	5f	5g I	5h J	5h K	5h L	5i M	5j N	5k O	Össz.
2	2	1	2	2	2	3	3	1	2	2	2	2	2	4	3	35

Az epoxigyanta gyártása sok milliárd dolláros nemzetközi iparág. Az epoxigyanta nagyon erős ragasztó, amit egy bisz-epoxid diaminnal történő reakciójával állítanak elő. A bisz-epoxidot **H**-ból és a **C** epiklórhidrinből állítják elő. **C**-t és **H**-t az alábbi séma szerint állíthatjuk elő.



A **C** epiklórhidrin szintézise a propén fény hatására lejátszódó klórozásával kezdődik.



NÉV:

KÓD: HUN-S

a) Rajzold fel **A** és **B** szerkezetét!

A	B
----------	----------

b) Írd fel a képletét egy olyan reagensnek, amivel **B** átalakítható a **C** epiklórhidrinné!

A **H** szintézise a benzol és propén között lejátszódó sav katalizálta folyamattal indul, ami során a **D** főtermék és az **E**, **F** melléktermékek keletkeznek.

c) Rajzold fel a **D**, **E** és **F** szerkezetét a következő adatok alapján:

D: Elemi összetétel: C 89,94%, H 10,06%, 6 jel van a ^{13}C NMR spektrumban

E: Elemi összetétel: C 88,82%, H 11,18%, 4 jel van a ^{13}C NMR spektrumban

F: Elemi összetétel: C 88,82%, H 11,18%, 5 jel van a ^{13}C NMR spektrumban



NÉV:

KÓD: HUN-S

D	E	F
----------	----------	----------

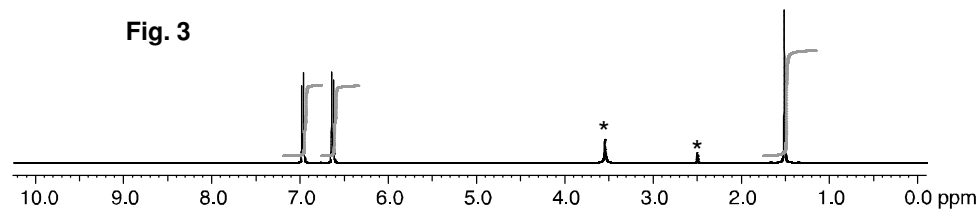
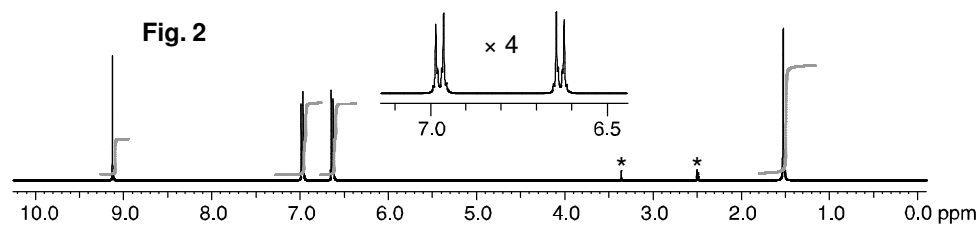
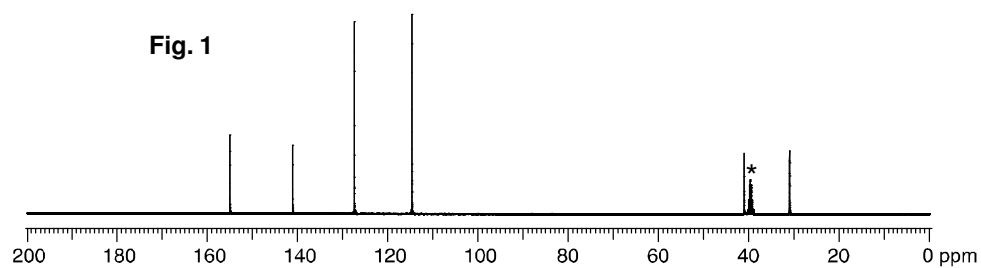
A **D** forró oldatán oxigént buborékoltatunk át, így kapjuk **G**-t, amiből sav hatására fenol (hidroxibenzol) és aceton (propanon) keletkezik.

G a keményítős, jodidos papírt sötétkék színűvé változtatja. **G**-nek 6 jele van a ^{13}C NMR spektrumban és a következőképpen néz ki a ^1H NMR spektruma: δ 7,78 (1H, s), 7,45-7,22 (5H, m), 1,56 (6H, s); D_2O hatására a $\delta = 7,78$ -as jel eltűnik a spektrumból.

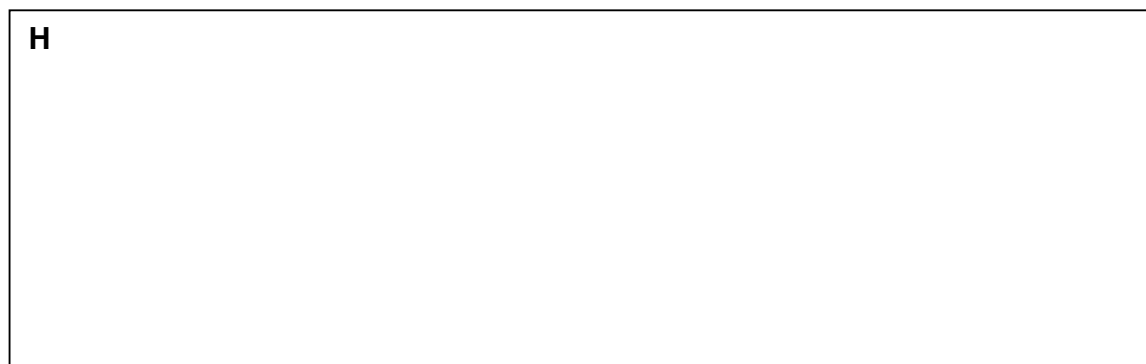
d) Rajzold fel a **G** szerkezetét!

G

A fenolt és az acetont sósavval kezelve kapjuk a **H** vegyületet. A **H** ^{13}C NMR spektruma a Fig. 1. ábrán, ^1H NMR spektruma (a 6,5 – 7,1 ppm régió négyszeres nagyításával) a Fig. 2. ábrán látható. Az egy csepp D_2O hozzáadása után kapott ^1H NMR spektrum a Fig. 3. ábrán látható. Az oldószer jeleit csillaggal megjelöltük (*).



e) Rajzold fel a H szerkezetét!





NÉV:

KÓD: HUN-S

- f) Rajzold fel a fenol egy olyan határszerkezetét, amivel a **H** keletkezése során megfigyelhető irányító hatás magyarázható!



Az **I** vegyület ugyancsak a fenol és acetone reakciójában keletkezik. **I** ^{13}C NMR spektrumában 12 jel található. A ^1H NMR spektruma a következő: 7,50-6,51 (8H, m), 5,19 (1H, s), 4,45 (1H, s), 1,67 (6H, s); D_2O hozzáadására a $\delta = 5,19$ és 4,45-ös csúcsok tűnnek el.

- g) Rajzold fel az **I** szerkezetét!

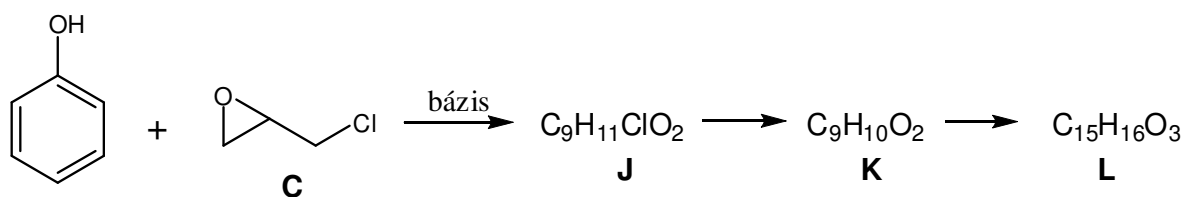


Feleslegben levő fenolt a **C** epiklórhidrinnel bázis jelenlétében reagáltatva az **L** vegyület képződik, aminek 6 jele van a ^{13}C NMR spektrumában. Ha a reakciót a teljes lejátszódás előtt megállítjuk, akkor a **J** és **K** vegyületeket is izolálhatjuk. Az **L** vegyület **K**-ból, míg **K** vegyület **J**-ből képződik.

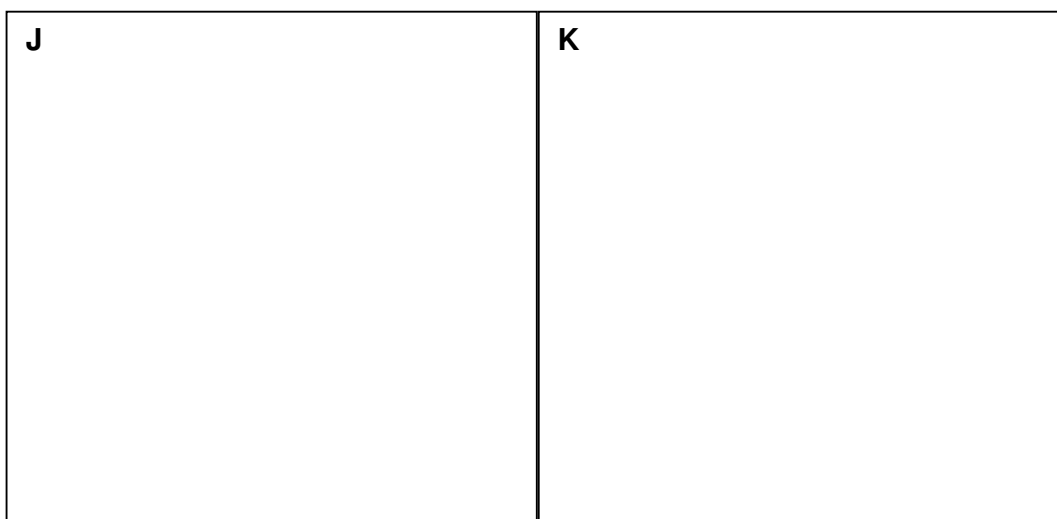


NÉV:

KÓD: HUN-S



h) Rajzold fel a **J**, **K** és **L** szerkezetét!



H-t nagy feleslegben vett **C** epiklórhidrinnel és bázissal reagáltatva az **M** bisz-epoxid monomer keletkezik. **M** nem tartalmaz sem klór atomot, sem OH csoportot.



NÉV:

KÓD: HUN-S

i) Írd fel az **M** szerkezetét!

M

H-t kis feleslegben vett epiklórhidrinnel és bázissal reagáltatva az **N** vegyület keletkezik. **N** képlete: **végcsoport1-[ismétlődő egység]_n-végcsoport2**, ahol n kb. 10-15. **N** nem tartalmaz klóratomot és ismétlődő egységenként csak egy OH csoport van benne.

j) Rajzold fel az **N** szerkezetét a fenti formában
(**végcsoport1-[ismétlődő egység]_n-végcsoport2**)!

N

k) Rajzold fel az **O** epoxigyanta polimer ismétlődő egységét! **O** az **M** bisz-epoxid és az etán-1,2-diamin reakciójában képződik.



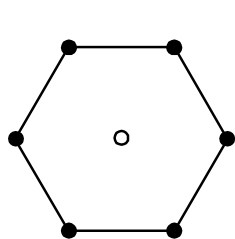
6. feladat

az egész 12%-a

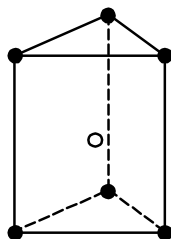
Átmenetifém-komplexek

6a	6b	6c	6d	6e	6f	6g	6h	6i	6j	6k	6l	Total
18	5	4	6	5	2	3	2	4	4	2	6	61

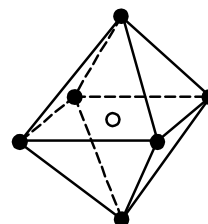
Alfred Werner az izomerek megszámlálását használta fel arra, hogy kikövetkeztesse a hatos koordinációjú fémkomplexek szerkezetét. Az alábbi három alakzatot vette számításba:



X



Y



Z

Minden szerkezetben az üres körök a központi fématomok, a fekete pöttyök a ligandumok helyzetét mutatják. Az **X** szerkezet egy planáris hatszög, az **Y** egy trigonális prizma, a **Z** szerkezet pedig egy oktaéder.

Ha azonosak a ligandumok, azaz a komplex általános képlete MA_6 – ahol A a ligandumot jelenti – akkor mindhárom esetben csak egyféle szerkezet lehetséges. Viszont ha egy vagy több akirális A ligandumot egy másik akirális ligandummal helyettesítünk, akkor mindegyik esetben kialakulhatnak geometriai izomerek. Az is lehetséges, hogy egy vagy több geometriai izomer optikailag aktív és enantiomerpárokat képez.

- a) Töltsd ki a következő táblázatot, és add meg, hogy az egyes szerkezeteknek hány geometriai izomere lehetséges! Az egyes sorokban az **X**, **Y** és **Z** szerkezetekben az A ligandumból egyet vagy többet a B egyfogú vagy a C–C, szimmetrikus, kétfogú ligandummal helyettesítünk. A kétfogú C–C ligandum csak két szomszédos pozícióban (az ábrákon összekötve) kapcsolódhat a központi atomhoz

Minden üres helyre írd be a geometriai izomerek számát! Ha az izomerek egyike enantiomerpárt képez, tegyél a négyzetbe egy csillagot is! Ha két



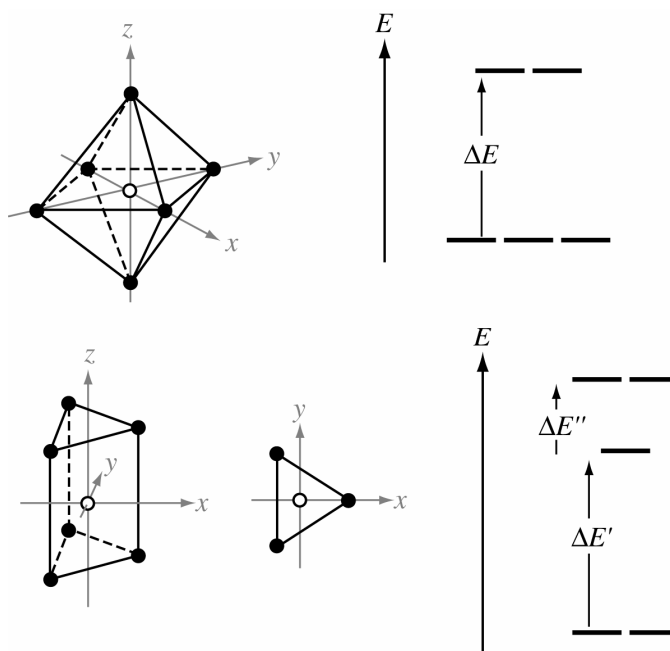
NÉV:

KÓD: HUN-S

geometriai izomernek van enantiomerpárja, akkor két csillagot írj a cellába a szám mellé, és így tovább. Ha például úgy gondolod, hogy öt geometriai izomer van, és azok közül háromnak van enantiomerpárja, akkor a cellába ezt írd: 5***!

	A geometriai izomerek száma		
	Planáris hatszög X	Trigonális prizma Y	Oktaéder Z
MA_6	1	1	1
MA_5B			
MA_4B_2			
MA_3B_3			
$MA_4(C-C)$			
$MA_2(C-C)_2$			
$M(C-C)_3$			

Nem ismert olyan komplex, aminek a szerkezete planáris hatszög lenne, viszont mind az **Y** trigonális prizma, mind a **Z** oktaéderes szerkezetre van példa. Ezekben a komplexekben – a komplex geometriájától függően – a fématom d pályáinak megfelelő tethető pályáknak különböző energiaszintjei vannak. A trigonális prizmás és az oktaéderes szerkezet esetében a pályák felhasadását az alábbi ábra mutatja.



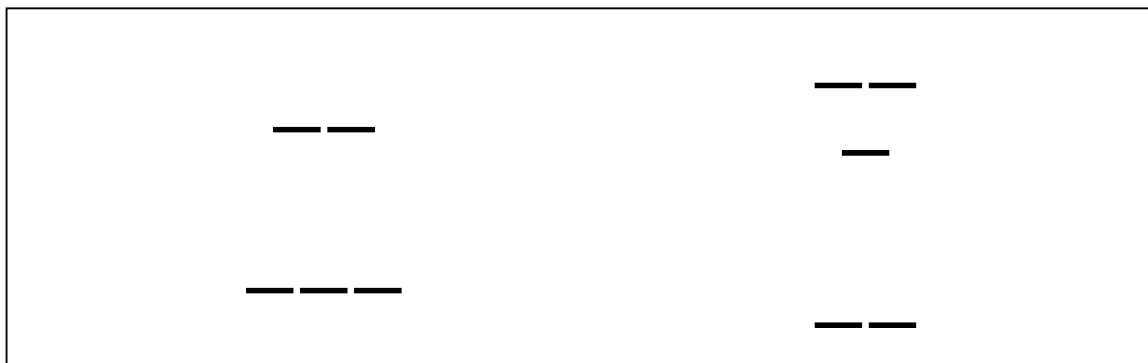
A pályák energiefelhasadásai, ΔE , $\Delta E'$ és $\Delta E''$ az adott komplextől függenek.



NÉV:

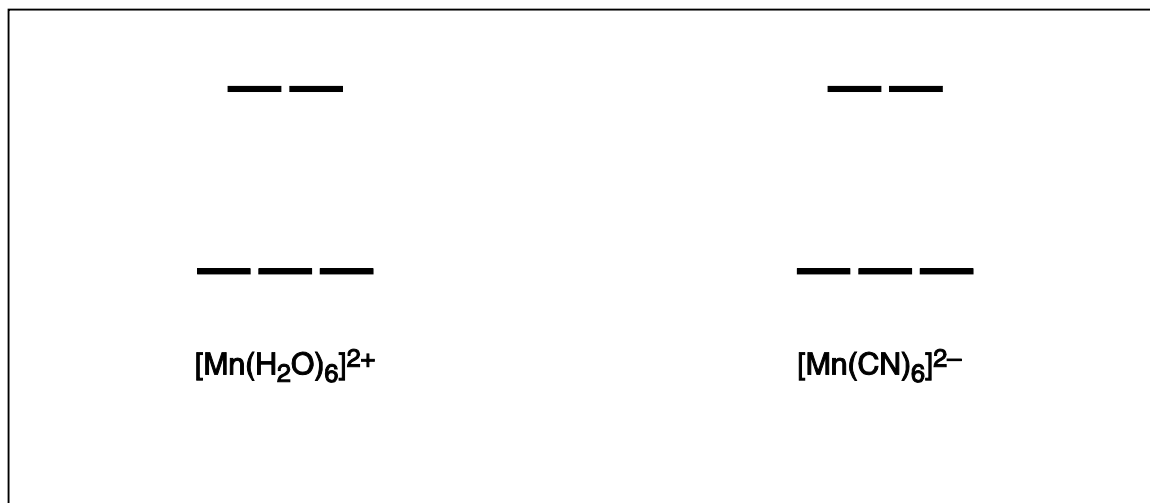
KÓD: HUN-S

- b) Mindkét felhasadási sémánál jelöld meg, hogy melyik vonalhoz melyik d pálya tartozik!



A $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ és a $[\text{Mn}(\text{CN})_6]^{2-}$ oktaéderes komplex. Az egyik mágneses momentuma 5,9 BM, a másiké 3,8 BM. Neked kell eldöntened, hogy melyik érték melyik komplexhez tartozik!

- c) Az alábbi diagramon rajzold fel mindkét komplex elektronkonfigurációját!





NÉV:

KÓD: HUN-S

- e) Írd fel a **C – G** vegyületek térszerkezetét, amennyire a megadott adatok alapján lehetséges!

C	D
----------	----------

E	F
----------	----------

G

Werner abban is az első volt, hogy egy oktaéderes, szénatomot nem tartalmazó vegyület, **H** enantiomereit szétválassza. A **H** vegyület csak kobaltot, ammóniát, kloridot és egyféle oxigéntartalmú specieszt (csak H_2O vagy HO^- vagy O^{2-} lehet) tartalmazott. A vegyület oktaéderes koordinációjú kobaltionokat tartalmaz. Az összes klorid ezüst-nitráttal történő titrálással könnyen eltávolítható volt. A kristályvizet nem tartalmazó **H** vegyület 0,2872 g tömegű mintájában az összes klorid megkötéséhez $22,8 \text{ cm}^3$ 0,100 M-os ezüst-nitrát-oldat volt szükséges.



NÉV:

KÓD: HUN-S

f) Számítsd ki a H vegyületben a klorid tömegszázalékát!

H savas közegben stabilis, lúgok hatására hidrolizál. A kristályvizet nem tartalmazó **H** 0,7934 g-os mintáját feleslegben nátrium-hidroxid vizes oldatával melegítették. Kobalt(III)-oxid keletkezett és ammóniagáz szabadult fel. A fejlődött ammóniát kiűzték és HCl 50,0 cm³ 0,500 M-os vizes oldatába vezették. A HCl feleslegének semlegesítésére 24,8 cm³ 0,500 M-os KOH-oldat fogyott.

A megmaradó kobalt(III)-oxid szuszpenziót lehűtötték, körülbelül 1 g kálium-jodidot adtak hozzá, majd a keveréket sósavval savanyították meg. A felszabadult jódot 0,200 M-os nátrium-tioszulfát-oldattal titrálták meg, amelyből 21,0 cm³ fogyott.

g) Számítsd ki H-ban az ammónia tömegszázalékát!



NÉV:

KÓD: HUN-S

- h)** Írd fel! a kobalt(III)-oxid és a kálium-jodid reakciójának egyenletét savas közegben!

- i)** Számítsd ki **H**-ban a kobalt tömegszázalékát!

- j)** Számítsd ki, melyik oxigéntartalmú specieszt tartalmazza **H**! A számítás menetét is tüntesd fel!



NÉV:

KÓD: HUN-S

k) Állapítsd meg **H** tapasztalati képletét!

l) Rajzold fel a királis **H** vegyület szerkezetét!