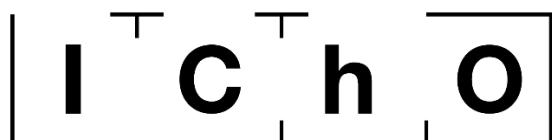


# ELMÉLETI FORDULÓ



**51st — International  
Chemistry Olympiad  
France — Paris — 2019**

Making science together!

2019-07-26



|                                                                                     |                                                               |                                                                                    |
|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|
|  | MINISTÈRE<br>DE L'ÉDUCATION<br>NATIONALE ET<br>DE LA JEUNESSE | MINISTÈRE<br>DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR,<br>DE LA RECHERCHE<br>ET DE L'INNOVATION |
|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|

## Instrukciók

- A feladatsor 60 oldalas.
- A **“Start”** utasítás kiadásakor kezdhetsz dolgozni.
- Ettől kezdve van **5 órád** a dolgozatra.
- Az eredményeidet és válaszaidat **tollal kell a válaszdobozokba írnod!** Ami máshol van, nem értékelik.
- Firkapapírnak a hátoldalakat használhatod, de ne feledd, ami nem a válaszdobozban van, nem értékelik.
- Csak a kapott tollat és számológépet használhatod.
- A hivatalos angol változatot elkérheted, ha nem voltunk képesek értelmesen lefordítani a feladatokat.
- Ha ki kell menned (WC, innivaló, ennivaló), emeld fel a megfelelő kártyát! Egy felvigyázó elkísér majd.
- Ha tesztkérdéseknél változtatni akarsz a válaszodon, feketítsd be a hibásan jelölt négyzetet, és rajzolj mellé egy újat!
- A felvigyázók szólnak a vége előtt fél órával.
- Amikor a **“Stop”** felszólítást hallod, azonnal be kell fejezned a munkát. Ha fél percen túl is dolgozol vagy írsz, törlik az eredményed.
- A **“Stop”** után tedd vissza a dolgozatot a borítékba, és várj a helyeden. A felvigyázó előtted fogja lezárni, és elviszi.

**EGY KALAPPAL!**

## Tartalomjegyzék

Az elméleti forduló 9 független feladatot tartalmaz. A súlyukat zárójelben tüntették fel.

|                                                   |      |        |
|---------------------------------------------------|------|--------|
| T1 feladat: Dobozok, elektronok, butadién         | (6%) | 8. o.  |
| T2 feladat: Hidrogéntermelés vízbontással         | (7%) | 13. o. |
| T3 feladat: Változatok ezüst-kloridra             | (5%) | 19. o. |
| T4 feladat: A lőportól a jód felfedezéséig        | (7%) | 24. o. |
| T5 feladat: Nanogépek komplexekkel                | (8%) | 30. o. |
| T6 feladat: Egy blokk-kopolimer jellemzése        | (8%) | 39. o. |
| T7 feladat: Gyűrűk táncoltatása egy [2]katenánban | (6%) | 47. o. |
| T8 feladat: Inozitok azonosítása és előállítása   | (6%) | 52. o. |
| T9 feladat: A levobupivakain szintézise           | (7%) | 57. o. |

## Állandók és egyenletek

A feladatokban feltételezzük, hogy a vizes oldatokban levő specieszek aktivitását jól közelíti a mol dm<sup>-3</sup>-ben megadott koncentrációjuk. A további egyszerűsítés végett a standard koncentrációt  $c^\circ = 1 \text{ mol dm}^{-3}$  nem tüntetjük fel.

Avogadro-állandó:

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

Gázállandó:

$$R = 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

Standard nyomás:

$$p^\circ = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$$

Légköri nyomás:

$$P_{\text{atm}} = 1 \text{ atm} = 1,013 \text{ bar} = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

A Celsius skála nullpontja:

$$273,15 \text{ K}$$

Faraday-állandó:

$$F = 9,649 \cdot 10^4 \text{ C mol}^{-1}$$

Watt:

$$1 \text{ W} = 1 \text{ J s}^{-1}$$

Kilowattóra:

$$1 \text{ kWh} = 3,6 \cdot 10^6 \text{ J}$$

Planck-állandó:

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

Fénysebesség vákuumban:

$$c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

Elemi töltés:

$$e = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Elektronvolt:

$$1 \text{ eV} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Elektromos teljesítmény:

$$P = \Delta E \times I$$

Hatásfok:

$$\eta = P_{\text{kinyert}} / P_{\text{befektetett}}$$

Planck-összefüggés:

$$E = hc/\lambda$$

Ideális gáz állapotegyenlete:

$$pV = nRT$$

Szabadentalpia:

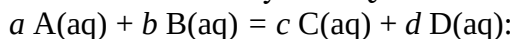
$$G = H - TS$$

$$\Delta_r G^\circ = -RT \ln K^\circ$$

$$\Delta_r G^\circ = -n F E_{\text{cell}}^\circ$$

$$\Delta_r G = \Delta_r G^\circ + RT \ln Q$$

Reakció reakcióhányadosa  $Q$



$$Q = \frac{[\text{C}]^c [\text{D}]^d}{[\text{A}]^a [\text{B}]^b}$$

Henderson–Hasselbalch-egyenlet:

$$\text{pH} = \text{p}K_a + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{AH}]}$$

Nernst-egyenlet:

$$E = E^\circ - \frac{RT}{zF} \ln Q$$

ha  $Q$  a redukciós félreakció reakcióhányadosa

$$\text{at } T = 298 \text{ K, } \frac{RT}{F} \ln 10 \approx 0,059 \text{ V}$$

Lambert-Beer-törvény:

$$A = \varepsilon l c$$

Integrált sebességi egyenletek:

- Nulladrendű:

$$[\text{A}] = [\text{A}]_0 - kt$$

- Elsőrendű:

$$\ln[\text{A}] = \ln[\text{A}]_0 - kt$$

- Másodrendű:

$$1/[\text{A}] = 1/[\text{A}]_0 + kt$$

Elsőrendű folyamat felezési ideje:

$$t_{1/2} = \ln 2 / k$$

Számátlag molekulatömeg,  $M_n$ :

$$M_n = \frac{\sum_i N_i M_i}{\sum_i N_i}$$

Tömegátlag molekulatömeg  $M_w$ :

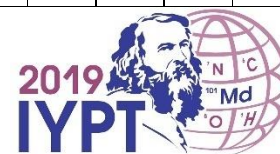
$$M_w = \frac{\sum_i N_i M_i^2}{\sum_i N_i M_i}$$

Polidiszperzitási index  $I_p$ :

$$I_p = \frac{M_w}{M_n}$$

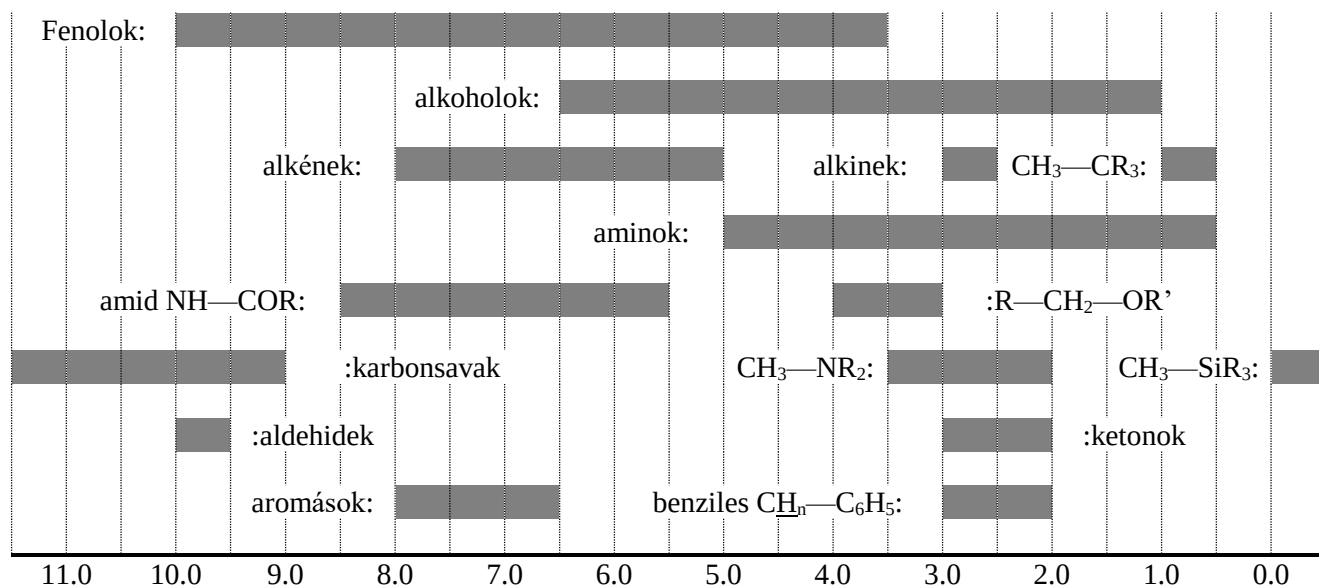
# Periódusos rendszer

|                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |
|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| 1                 |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   | 18                |
| 1<br>H<br>1.008   | 2                 |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   | 13                | 14                | 15                | 16                | 17                | 2<br>He<br>4.003  |
| 3<br>Li<br>6.94   | 4<br>Be<br>9.01   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   | 5<br>B<br>10.81   | 6<br>C<br>12.01   | 7<br>N<br>14.01   | 8<br>O<br>16.00   | 9<br>F<br>19.00   | 10<br>Ne<br>20.18 |
| 11<br>Na<br>22.99 | 12<br>Mg<br>24.31 | 3                 | 4                 | 5                 | 6                 | 7                 | 8                 | 9                 | 10                | 11                | 12                | 13<br>Al<br>26.98 | 14<br>Si<br>28.09 | 15<br>P<br>30.97  | 16<br>S<br>32.06  | 17<br>Cl<br>35.45 | 18<br>Ar<br>39.95 |
| 19<br>K<br>39.10  | 20<br>Ca<br>40.08 | 21<br>Sc<br>44.96 | 22<br>Ti<br>47.87 | 23<br>V<br>50.94  | 24<br>Cr<br>52.00 | 25<br>Mn<br>54.94 | 26<br>Fe<br>55.85 | 27<br>Co<br>58.93 | 28<br>Ni<br>58.69 | 29<br>Cu<br>63.55 | 30<br>Zn<br>65.38 | 31<br>Ga<br>69.72 | 32<br>Ge<br>72.63 | 33<br>As<br>74.92 | 34<br>Se<br>78.97 | 35<br>Br<br>79.90 | 36<br>Kr<br>83.80 |
| 37<br>Rb<br>85.47 | 38<br>Sr<br>87.62 | 39<br>Y<br>88.91  | 40<br>Zr<br>91.22 | 41<br>Nb<br>92.91 | 42<br>Mo<br>95.95 | 43<br>Tc<br>-     | 44<br>Ru<br>101.1 | 45<br>Rh<br>102.9 | 46<br>Pd<br>106.4 | 47<br>Ag<br>107.9 | 48<br>Cd<br>112.4 | 49<br>In<br>114.8 | 50<br>Sn<br>118.7 | 51<br>Sb<br>121.8 | 52<br>Te<br>127.6 | 53<br>I<br>126.9  | 54<br>Xe<br>131.3 |
| 55<br>Cs<br>132.9 | 56<br>Ba<br>137.3 | 57-71             | 72<br>Hf<br>178.5 | 73<br>Ta<br>180.9 | 74<br>W<br>183.8  | 75<br>Re<br>186.2 | 76<br>Os<br>190.2 | 77<br>Ir<br>192.2 | 78<br>Pt<br>195.1 | 79<br>Au<br>197.0 | 80<br>Hg<br>200.6 | 81<br>Tl<br>204.4 | 82<br>Pb<br>207.2 | 83<br>Bi<br>209.0 | 84<br>Po<br>-     | 85<br>At<br>-     | 86<br>Rn<br>-     |
| 87<br>Fr<br>-     | 88<br>Ra<br>-     | 89-103            | 104<br>Rf<br>-    | 105<br>Db<br>-    | 106<br>Sg<br>-    | 107<br>Bh<br>-    | 108<br>Hs<br>-    | 109<br>Mt<br>-    | 110<br>Ds<br>-    | 111<br>Rg<br>-    | 112<br>Cn<br>-    | 113<br>Nh<br>-    | 114<br>Fl<br>-    | 115<br>Mc<br>-    | 116<br>Lv<br>-    | 117<br>Ts<br>-    | 118<br>Og<br>-    |
|                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |
|                   |                   | 57<br>La<br>138.9 | 58<br>Ce<br>140.1 | 59<br>Pr<br>140.9 | 60<br>Nd<br>144.2 | 61<br>Pm<br>-     | 62<br>Sm<br>150.4 | 63<br>Eu<br>152.0 | 64<br>Gd<br>157.3 | 65<br>Tb<br>158.9 | 66<br>Dy<br>162.5 | 67<br>Ho<br>164.9 | 68<br>Er<br>167.3 | 69<br>Tm<br>168.9 | 70<br>Yb<br>173.0 | 71<br>Lu<br>175.0 |                   |
|                   |                   | 89<br>Ac<br>-     | 90<br>Th<br>232.0 | 91<br>Pa<br>231.0 | 92<br>U<br>238.0  | 93<br>Np<br>-     | 94<br>Pu<br>-     | 95<br>Am<br>-     | 96<br>Cm<br>-     | 97<br>Bk<br>-     | 98<br>Cf<br>-     | 99<br>Es<br>-     | 100<br>Fm<br>-    | 101<br>Md<br>-    | 102<br>No<br>-    | 103<br>Lr<br>-    |                   |



<sup>1</sup>H NMR

## Hidrogén kémiai eltolódások (ppm-ben /TMS)



## H-H csatolási állandók (Hz-ben)

| Hidrogén típusa                                           | $ J_{ab} $ (Hz)                                                                                     |
|-----------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\text{R}_2\text{CH}_a\text{H}_b$                         | 4-20                                                                                                |
| $\text{R}_2\text{H}_a\text{C—CR}_2\text{H}_b$             | 2-12<br>szabad forgás esetén: 6-8<br>ax-ax (ciklohexán): 8-12<br>ax-eq vagy eq-eq (ciklohexán): 2-5 |
| $\text{R}_2\text{H}_a\text{C—CR}_2\text{—CR}_2\text{H}_b$ | szabad forgás esetén: < 0,1<br>egyébként (merez): 1-8                                               |
| $\text{RH}_a\text{C=CRH}_b$                               | cisz: 7-12<br>transz: 12-18                                                                         |
| $\text{R}_2\text{C=CH}_a\text{H}_b$                       | 0,5-3                                                                                               |
| $\text{H}_a(\text{CO})\text{—CR}_2\text{H}_b$             | 1-3                                                                                                 |
| $\text{RH}_a\text{C=CR—CR}_2\text{H}_b$                   | 0,5-2,5                                                                                             |

eq = ekvatoriális, ax = axiális

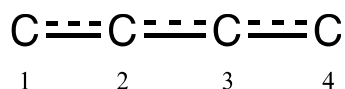
**IR spektroszkópiai táblázat**

| Rezgési mód                | $\sigma$ (cm <sup>-1</sup> ) | Intenzitás   |
|----------------------------|------------------------------|--------------|
| alkohol O—H (nyújtás)      | 3600-3200                    | erős         |
| karbonsav O—H (nyújtás)    | 3600-2500                    | erős         |
| N—H (nyújtás)              | 3500-3350                    | erős         |
| $\equiv$ C—H (nyújtás)     | 3300                         | erős         |
| =C—H (nyújtás)             | 3100-3000                    | gyenge       |
| C—H (nyújtás)              | 2950-2840                    | gyenge       |
| —(CO)—H (nyújtás)          | 2900-2800                    | gyenge       |
| C $\equiv$ N (nyújtás)     | 2250                         | erős         |
| C $\equiv$ C (nyújtás)     | 2260-2100                    | változó      |
| aldehid C=O (nyújtás)      | 1740-1720                    | erős         |
| anhidrid C=O (nyújtás)     | 1840-1800; 1780-1740         | gyenge; erős |
| észter C=O (nyújtás)       | 1750-1720                    | erős         |
| keton C=O (nyújtás)        | 1745-1715                    | erős         |
| amid C=O (nyújtás)         | 1700-1500                    | erős         |
| alkén C=C (nyújtás)        | 1680-1600                    | gyenge       |
| aromás C=C (nyújtás)       | 1600-1400                    | gyenge       |
| CH <sub>2</sub> (hajlítás) | 1480-1440                    | közepes      |
| CH <sub>3</sub> (hajlítás) | 1465-1440; 1390-1365         | közepes      |
| C—O—C (nyújtás)            | 1250-1050 (több sáv)         | erős         |
| C—OH (nyújtás)             | 1200-1020                    | erős         |
| NO <sub>2</sub> (nyújtás)  | 1600-1500; 1400-1300         | erős         |

| T1 feladat<br>6% | Kérdés | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8   | 9   | 10 | 11 | Össz |
|------------------|--------|---|---|---|---|---|---|---|-----|-----|----|----|------|
|                  | Max    | 3 | 4 | 4 | 2 | 3 | 2 | 2 | 4.5 | 2.5 | 3  | 3  | 33   |
|                  | Pont   |   |   |   |   |   |   |   |     |     |    |    |      |

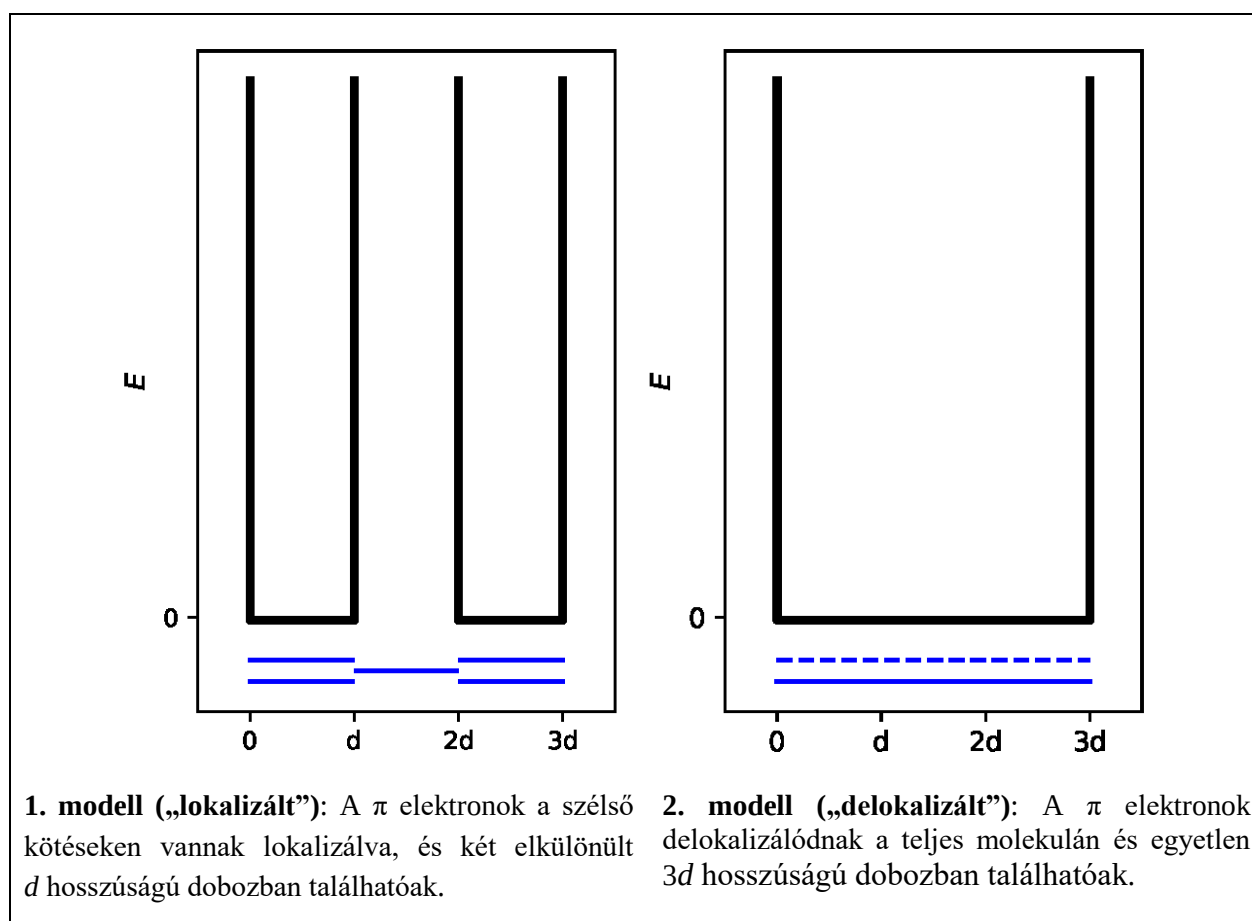
## T1 feladat: Dobozok, elektronok, butadién

A buta-1,3-dién molekulát gyakran váltakozó egyszeres és kettős kötésekkel írják fel:  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ . Mindazonáltal a reaktivitása nem teljesen konzisztens ezzel a leírással, és a  $\pi$  elektronokat jobban írja le, ha három kötésen elosztva írjuk fel őket:



A rendszer modellezhető egy egydimenziós dobozként (azaz potenciálgödörként), amiben az elektronok szabadon mozognak. Az  $L$  hosszúságú dobozba zárt elektron energiája:  $E_n = \frac{n^2 h^2}{8m_e L^2}$ , ahol  $n$  egy **nem-zéró** pozitív egész szám.

- Két eltérő modellt vizsgálunk először. **Vázold fel** legalább a három legalacsonyabb  $E_n$  energiaszintet **mindkét modell** esetén a megfelelő diagramra! Látszódjon, hogy térnek el a relatív energiák modellen belül és a modellek között!





2. **Helyezd el** a  $\pi$  elektronokat az 1. modellre rajzolt diagramon, és **add meg** a  $\pi$  rendszer teljes energiájának kifejezését az 1. modell esetén a  $h$ ,  $m_e$  és  $d$  felhasználásával!

$$E(1) =$$

3. **Helyezd el** a  $\pi$  elektronokat a 2. modellre rajzolt diagramon, és **add meg** a  $\pi$  rendszer teljes energiájának kifejezését a 2. modell esetén a  $h$ ,  $m_e$  és  $d$  felhasználásával!

$$E(2) =$$

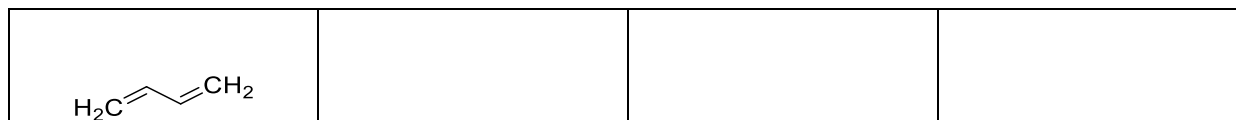
A konjugációs energia az adott  $\pi$  rendszer teljes energiája mínusz az ugyanannyi  $\pi$  elektront tartalmazó etilénmolekulák energiájának összege.

4. **Fejezd ki** a butadién  $\Delta E_c$  konjugációs energiáját a  $h$ ,  $m_e$  és  $d$  felhasználásával!

$$\Delta E_c =$$

Az 1. és 2. modell túl egyszerű. Egy újabb modellt tárgyalnak a következő kérdések.

5. **Rajzold fel** a butadién további három rezonanciájának Lewis-szerkezetét!



A 2. modellt a szénatomok méretét is figyelembe véve a következő módon alakítjuk a 3. modellé:

- a doboz mérete  $L$ , és a 0 és  $L$  koordináták között helyezkedik el;
- a szénatomok az  $L/8$ ;  $3L/8$ ;  $5L/8$  és  $7L/8$  koordinátáknál találhatók.

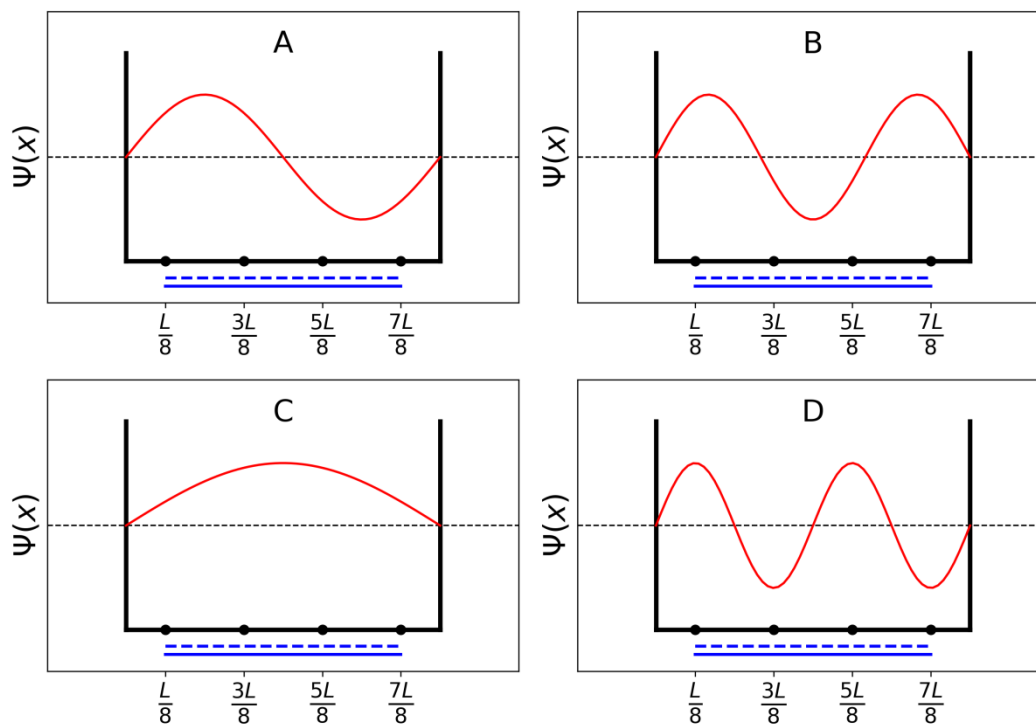
A  $n$ . energiaszinthez tartozó  $\pi$  hullámfüggvény:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

az  $N$  db  $\pi$  elektront tartalmazó rendszer  $\pi$  elektronsűrűsége:

$$\rho(x) = 2 \sum_{i=1}^{N/2} |\psi_i(x)|^2$$

A  $\pi$  rendszer négy molekulapályájához tartozó  $\pi$  hullámfüggvényt ábrázolnak a diagramok (összekeverve).



6. **Rendezd sorba** a négy  $\pi$  hullámfüggvény energiáit ( $E_A$ ,  $E_B$ ,  $E_C$  és  $E_D$ )!

$< \quad < \quad <$

7. **Add meg** a butadiénben elektronokkal feltöltött pályák jelét (A, B, C, D)!

8. A 3. modellt használva **add** meg a betöltött energiaszintek  $\psi_n$  jelű  $\pi$  hullámfüggvényeinek értékét a 0,  $L/4$  és  $L/2$  pozíciókban, az  $L$  függvényében ( $n = 1$  és  $n = 2$  esetére)!

$$\psi_1(0) =$$

$$\psi_1\left(\frac{L}{4}\right) =$$

$$\psi_1\left(\frac{L}{2}\right) =$$

$$\psi_2(0) =$$

$$\psi_2\left(\frac{L}{4}\right) =$$

$$\psi_2\left(\frac{L}{2}\right) =$$

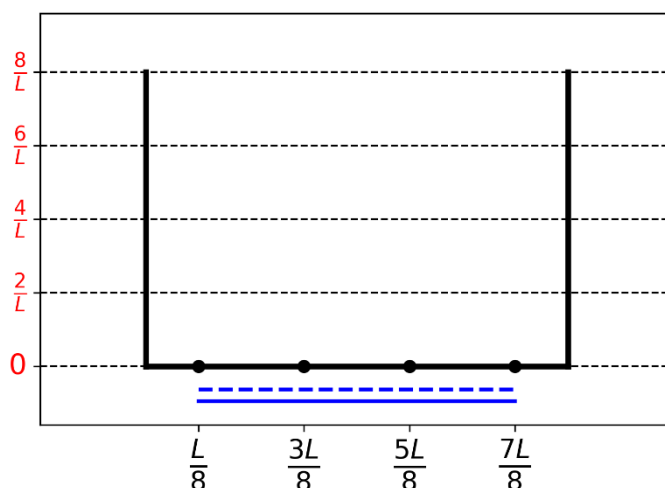
9. **Add** meg a  $\pi$  elektronsűrűség értékének kifejezését a 3. modellben a 0,  $L/4$  és  $L/2$  pozíciókban!

$$\rho(0) =$$

$$\rho\left(\frac{L}{4}\right) =$$

$$\rho\left(\frac{L}{2}\right) =$$

10. **Rajzold fel** a  $\pi$  elektronsűrűség függvényét 0 és  $L$  között!



11. **Rendezd** sorba a következő C-C kötések (B1, B2, ..., B5) növekvő kötéshossz szerint! Használd az = vagy < jeleket!

- B1: C1C2 a butadién molekulában  
 B2: C2C3 a butadién molekulában  
 B3: C3C4 a butadién molekulában  
 B4: CC az etán molekulában  
 B5: CC az etén molekulában

| Feladat | Kérdés | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | Össz |
|---------|--------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|------|
| T2      | Max    | 1 | 4 | 2 | 3 | 3 | 6 | 4 | 1 | 8 | 2  | 34   |
| 7%      | Pont   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |    |      |

## T2 feladat: Hidrogéntermelés vízbontással

### Adatok:

| Vegyület                                           | H <sub>2</sub> (g) | H <sub>2</sub> O(l) | H <sub>2</sub> O(g) | O <sub>2</sub> (g) |
|----------------------------------------------------|--------------------|---------------------|---------------------|--------------------|
| $\Delta_f H^\circ$ (kJ mol <sup>-1</sup> )         | 0                  | -285,8              | -241,8              | 0                  |
| $S_m^\circ$ (J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ) | 130,6              | 69,9                | 188,7               | 205,2              |

A hidrogén (H<sub>2</sub>) a szén-dioxid kibocsátással járó tüzelőanyagok egyik alternatívája. Így az előállításának költségét és környezeti hatását fontos lenne csökkenteni. Az egyik ígéretes technológiai irány a vízbontás.

1. **Írd le** a folyékony víz bontásának rendezett egyenletét! A víz együtthatója az egyenletben 1 legyen!

2. A hőtani adatok alapján **igazold számítással**, hogy vajon a reakció termodinamikailag preferált-e 298 K-en!

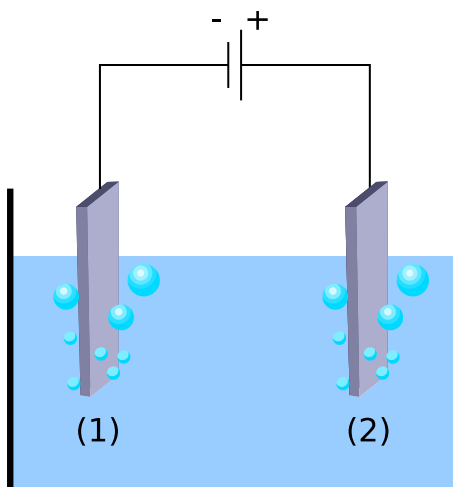
Számolások:

A reakció termodinamikailag preferált-e?

☐ Igen

☐ Nem

A vízbontás elektrokémiai úton is megoldható, ha pl. két elektród merül egy savanyú vizes oldatba, és áramforrást kapcsolnak rájuk (1. ábra). Mindkét elektródon gáz fejlődik.



1. ábra – Vízbontás elektrokémiai cellában

3. **Írd le** az egyes elektródokon lejátszódó bruttó elektrokémiai folyamatok egyenletét!

Az (1) elektródon:

A (2) elektródon:

4. Csak a kapott termodinamikai adatok (vagy a 2. kérdés) alapján **vezesd le** annak feltételét, hogy a folyamat termodinamikailag preferált legyen 298 K-en és az összes reagens és termék standard állapota esetén! A feltételt az elektródokra adott  $\Delta E_{\text{ráadott}}$  és a meghatározandó  $\Delta E_{\text{th}}$  feszültség viszonyára add meg! **Jelöld meg** a helyes feltételt, és **add** meg a számértékét 3 tizedesjegyre!

Számolás:

☐  $\Delta E_{\text{ráadott}} = \Delta E_{\text{th}}$

☐  $\Delta E_{\text{ráadott}} > \Delta E_{\text{th}}$

☐  $\Delta E_{\text{ráadott}} < \Delta E_{\text{th}}$

$\Delta E_{\text{th}} = \dots\dots\dots \text{ V (3 tizedesjegyet adj meg!)}$

*Ha nem tudnád  $\Delta E_{\text{th}}$ -t kiszámolni, a továbbiakban  
használd 1,200 V-ot!*

Kísérletileg a vízbontáshoz magasabb feszültség szükséges. Egy adott Pt katódra a vízbontáshoz minimálisan szükséges  $\Delta E_{\min}$  feszültség függ az anód típusától, ahogy a táblázat mutatja:

| Anód                           | $\Delta E_{\min}$ (V) |
|--------------------------------|-----------------------|
| IrO <sub>x</sub>               | 1,6                   |
| NiO <sub>x</sub>               | 1,7                   |
| CoO <sub>x</sub>               | 1,7                   |
| Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 1,9                   |

A  $\Delta E_{\min}$  és  $\Delta E_{\text{th}}$  közti különbség felelős a készülékben tapasztalható veszteségekért.

5. **Add meg** a készülék  $\eta_{\text{elec}}$  teljesítmény-hatásfokának (a teljesítmény milyen hányada hasznosul vízbontásra) kifejezését a  $\Delta E_{\text{th}}$  és  $\Delta E_{\min}$  segítségével! Azonos áramerősséget feltételezve **számítsd ki** a víz elektrolízisének hatásfokát Pt katód és Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> anód esetére! Továbbá **válaszd ki** a leghatékonyabb katódanyagot a táblázatból!

$\eta_{\text{elec}} =$

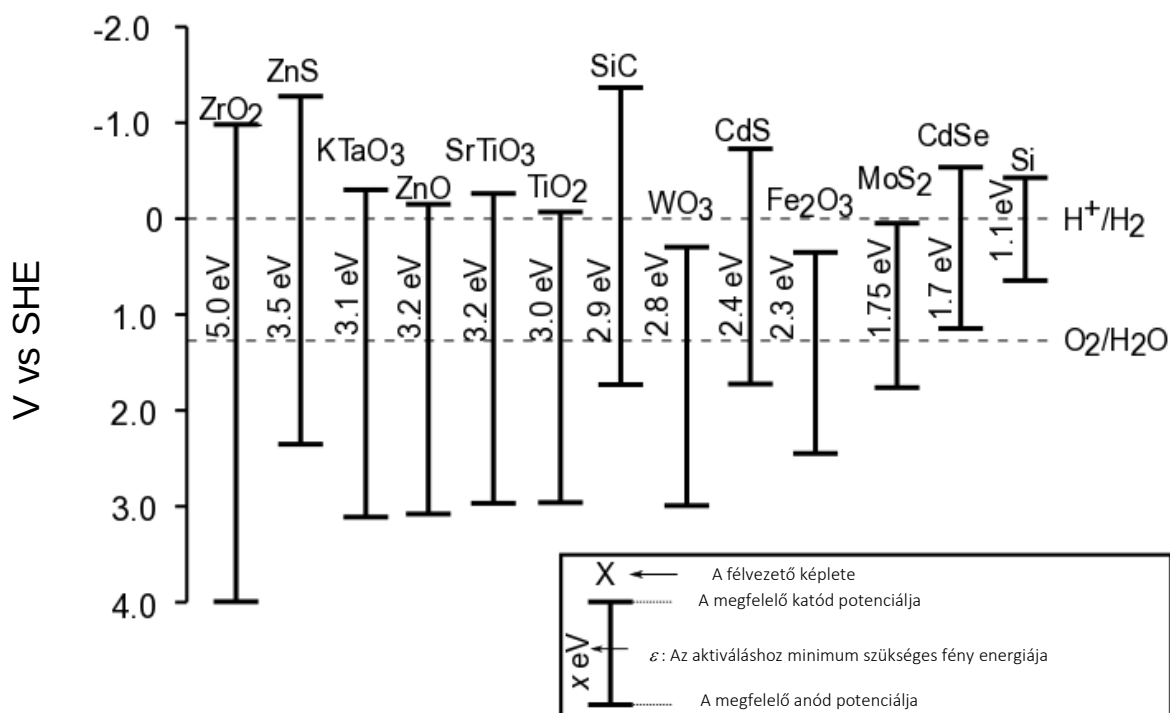
Hatásfok Pt és Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> elektród esetén:

$\eta_{\text{elec}} =$  %

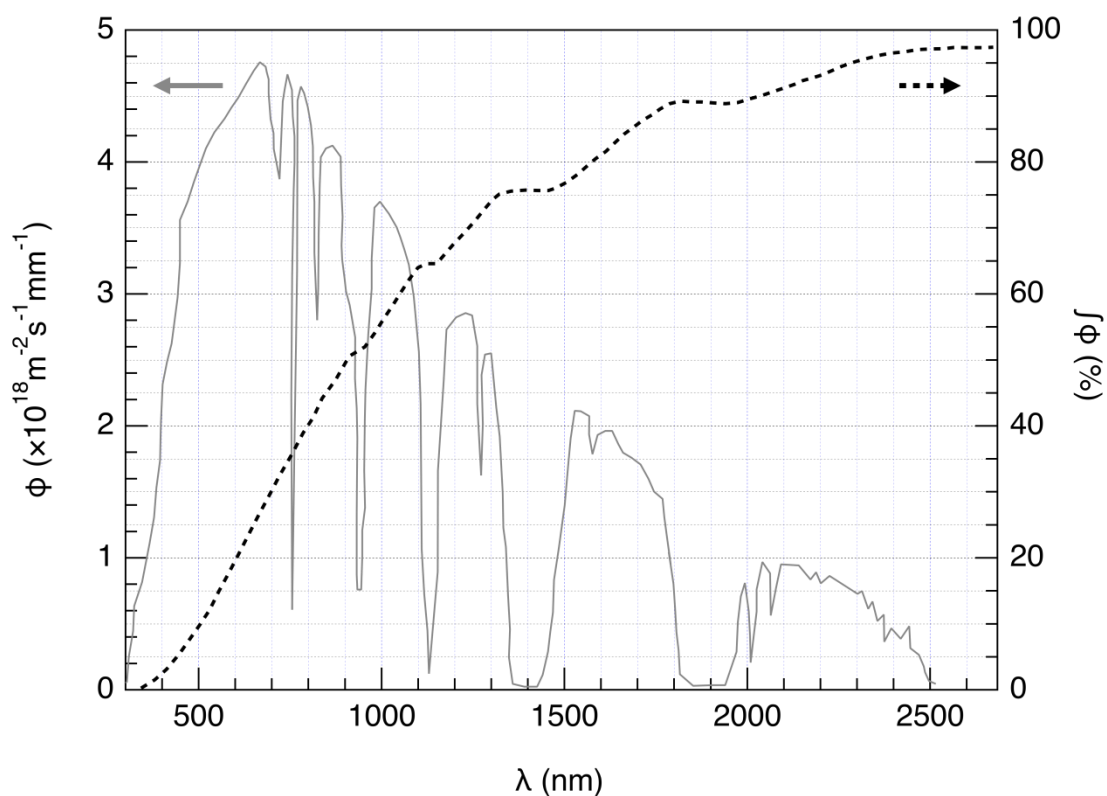
A leghatékonyabb anód:

*Ha nem tudnád  $\eta_{\text{elec}}$ -t kiszámolni, a továbbiakban használd  $\eta_{\text{elec}} = 75\%$ -ot!*

A víz elektrolízisének alternatívája a direkt fotokatalitikus vízbontás. Ennek során olyan félvezetőket használnak, amelyeket a fényelnyelés aktiválni képes.



2. ábra – Az aktiválás feltétele és az egyes félvezetőkhez társítható elektródpotenciálok. A szaggatott vonalak a víz oxidációjának és redukciójának potenciálját mutatják. SHE = Std. Hidrogén Elektród



3. ábra – Baloldali tengely és folyamatos vonal: A napból érkező fotonok  $\phi$  spektrális eloszlása. A fotonfluxus a félvezető egységnyi területére egységnyi idő alatt érkező fotonok száma. Jobboldali tengely és szaggatott vonal: az összesített fotonfluxus (az adott hullámhossznál kisebb hullámhosszú fotonok részaránya).

6. **Becsüld meg**, hogy a nap fotonfluxusának mekkora hányada képes az alábbi félvezetőket aktiválni:  $\text{TiO}_2$ , CdS, Si. Egyértelműen **tüntesd** fel a használt egyenleteket és mértékegységeket!

Magyarázat / számolás:



|                  | A becsült hányad |
|------------------|------------------|
| TiO <sub>2</sub> | %                |
| CdS              | %                |
| Si               | %                |

A félvezető aktiválása a felületi potenciálok megváltozását eredményezi, és így a félvezető két, eltérő potenciálú elektródként fog viselkedni.

7. A 2. ábra adatait használva **válaszd ki** az(oka)t a félvezető(ke)t a listából, amelyek aktiválás után a vízbontásban katódként és anódként egyaránt képesek szerepet játszani!

|                                           |                                                         |                                           |                                          |
|-------------------------------------------|---------------------------------------------------------|-------------------------------------------|------------------------------------------|
| <input type="checkbox"/> ZrO <sub>2</sub> | <input type="checkbox"/> ZnO                            | <input type="checkbox"/> TiO <sub>2</sub> | <input type="checkbox"/> WO <sub>3</sub> |
| <input type="checkbox"/> CdS              | <input type="checkbox"/> Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | <input type="checkbox"/> CdSe             | <input type="checkbox"/> Si              |

8. **Add meg** azt a félvezetőt, amelyik katódként és anódként egyaránt viselkedve várhatóan a leghatékonyabb lesz vízbontásra azonos mennyiségű napsugárzás esetén!

Egy félvezetőt szimulált napfénnel besugározva tanulmányozták a H<sub>2</sub> és O<sub>2</sub> fejlődését  $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on és  $p_{\text{atm}}$ -n. A beeső fény teljesítménye  $P = 1,0\text{ kW m}^{-2}$ , a fotoelektród felületete  $S = 16\text{ mm}^2$  volt.  $V = 0,37\text{ cm}^3\text{ H}_2(\text{g})$  fejlődött  $\Delta t = 1$  óra reakció során.

9. **Számítsd ki** a konverzió  $\eta_{\text{direkt}}$  teljesítmény-hatásfokát!

Számítás:

$$\eta_{\text{direkt}} = \quad \%$$

*Ha nem tudnád  $\eta_{\text{direkt}}$ -et kiszámolni, a továbbiakban használj  $\eta_{\text{direkt}} = 10\%$ -ot!*

A napenergia hidrogénné alakításának két módját: a direkt fotokatalízist és a napelemet elektrolízissel kombináló indirekt fotoelektrolízist így össze tudod hasonlítani. A piacon elérhető napelemek közelítő hatásfoka  $\eta_{\text{napelem}} = 20\%$ .

10. **Vesd össze** a két mód  $\eta_{\text{direkt}}$  és  $\eta_{\text{indirekt}}$  hatásfokát, ha  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  és Pt elektródokat használnak elektrolízisre!

Számítás:

☐  $\eta_{\text{direkt}} > \eta_{\text{indirekt}}$

☐  $\eta_{\text{direkt}} \approx \eta_{\text{indirekt}}$

☐  $\eta_{\text{direkt}} < \eta_{\text{indirekt}}$

| Feladat  | Kérdés | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | Össz |
|----------|--------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|------|
| T3<br>5% | Max    | 1 | 3 | 3 | 3 | 4 | 2 | 7 | 2 | 2 | 3  | 4  | 6  | 40   |
|          | Pont   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |    |    |    |      |

## T3 feladat: Változatok ezüst-kloridra

### Adatok 298 K-en:

$pL_1(\text{AgCl}) = 9,7$ ;  $pL_2(\text{Ag}_2\text{CrO}_4) = 12$

Az  $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_n]^+$  komplex stabilitási állandója:  $\beta_n = 10^{7,2}$

A standard hidrogénelektrodhoz viszonyított elektródpotenciálok:

Az  $\text{Ag}^+/\text{Ag}(\text{sz})$  standardpotenciálja:  $E^\circ(\text{Ag}^+/\text{Ag}(\text{sz})) = 0,80 \text{ V}$

Az  $\text{O}_2(\text{aq})/\text{HO}^-(\text{aq})$  rendszer látszólagos potenciálja (tengervízben):  $E'(\text{O}_2(\text{aq})/\text{HO}^-(\text{aq})) = 0,75 \text{ V}$

### A rész: Idézetek Louis Joseph Gay-Lussac kémia előadásából

A következő idézetek Louis Joseph Gay-Lussac (francia vegyész és fizikus, 1778–1850) az ezüst-klorid tulajdonságaival foglalkozó előadásából származnak.

**A idézet:** „Az ezüst-kloridról, egy tejfehér, szilárd anyagról fogok beszélni, amelyet nagyon egyszerűen előállíthatunk úgy, hogy ezüst-nitrát vizes oldatába sósavat öntünk.”

**B idézet:** „Ez a só íztelen, mivelhogy oldhatatlan.”

**C idézet:** „Ez a vegyület teljesen oldhatatlan alkoholban csakúgy, mint savakban, kivéve a tömény sósavat, amelyben készségesen oldódik.”

**D idézet:** „Másképpen az ezüst-klorid kitűnően oldódik az ammónia vizes oldatában.”

**E idézet:** „Azután az ezüst-kloridot ismét láthatóvá tehetjük sav hozzáadásával, amely reagál az ammóniával.”

**F idézet:** „Ha egy ezüsttálban sós tengervizet párologtatunk el, akkor tejfehér szilárd anyaggal szennyezett nátrium-kloridot kapunk.”

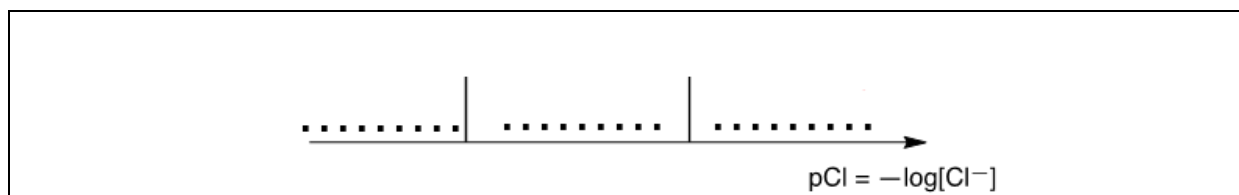
1. **A idézet:** Írd le a  $\text{AgCl}(\text{sz})$  képződésének rendezett egyenletét!

2. **B idézet:** Számítsd ki az  $\text{AgCl}(\text{sz})$  vízben mérhető oldhatóságát 298 K-en  $\text{mol dm}^{-3}$  egységben!

Számítás:

$s =$   $\text{mol dm}^{-3}$

3. **C idézet:** A kloridionokat nagy koncentrációban tartalmazó oldatban egy jól definiált, 1 : 2 sztöchiometriai arányú komplex képződik. Az alábbi tengelyen (amely a pCl növekedését jelzi balról jobbra) kvalitatíve **helyezd el** az egyes szakaszokon az elsődlegesen jellemző ezüsttartalmú speciesz képletét (még ha szilárd is)! A határok pCl értékeit nem kell megadni!



**D idézet:** Amikor ammóniát adunk az ezüst-kloridhoz, egy jól definiált,  $n$  ligandumos komplex képződik.

4. **Írd fel** az  $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_n]^+$  komplex ezüst-kloridból való képződésének rendezett egyenletét, és **számítsd ki** a megfelelő egyensúlyi állandót is!

Egyenlet:

Számítás:

$$K =$$

*Ha nem tudod kiszámítani  $K$  értékét,*

*a feladat hátralevő részében használd a következő értéket:  $K = 10^{-3}$ !*

5. Ammóniát adunk 1 liter vízben lévő 0,1 mol ezüst-kloridhoz, amíg az utolsó szilárd szemcse is eltűnik. Ebben a pillanatban:  $[\text{NH}_3] = 1,78 \text{ mol dm}^{-3}$ . **Határozd meg** a komplex sztöchiometriáját, ha elhanyagoljuk a térfogatváltozást!

Számítás:

$$n =$$

6. **Írd le** az **E idézetnek** megfelelő rendezett kémiai egyenletet!

7. Tekintsük úgy, hogy a tengervíz enyhén lúgos és dioxidigénben gazdag, és hogy ilyen környezetben az ezüst redukálni képes a dioxidigént. **Írd fel** az **F idézetben** említett szilárd anyag képződésének rendezett egyenletét! A dioxidigén sztöchiometriai száma legyen 1! **Számítsd ki** a folyamat egyensúlyi állandóját 298 K-en!

Egyenlet:

Számítás:

$K =$

### B rész: A Mohr-módszer

A Mohr-módszer a  $\text{Cl}^-$ -ionok  $\text{Ag}^+$ -ionokkal történő titrálása kálium-kromát ( $2\text{K}^+$ ,  $\text{CrO}_4^{2-}$ ) jelenlétében. Három csepp ( $\sim 0,5$  ml) kb.  $7,76 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ -es  $\text{K}_2\text{CrO}_4$ -oldatot adunk  $V_0 = 20,00$  ml, ismeretlen koncentrációjú ( $C_{\text{Cl}}$ ) nátrium-klorid-oldathoz. Ezt az oldatot titráljuk ezüst-nitrát-oldattal ( $\text{Ag}^+$ ,  $\text{NO}_3^-$ ), amelyben:  $C_{\text{Ag}} = 0,050 \text{ mol dm}^{-3}$ . Ez az **A** szilárd anyag azonnali keletkezéséhez vezet. Egy vörös csapadék (szilárd **B**)  $V_{\text{Ag}} = 4,30$  ml hozzáadásakor jelenik meg.

8. **Írd fel** a kísérlet közben lezajló két reakció rendezett egyenletét! **Számítsd ki** a megfelelő egyensúlyi állandókat is!

$$K^{\circ}_1 =$$

$$K^{\circ}_2 =$$

9. **Azonosítsd** a szilárd anyagokat!

Szilárd **A** anyag képlete:

Szilárd **B** anyag képlete:

10. **Számítsd ki** a kloridionok ismeretlen  $C_{\text{Cl}}$  koncentrációját a nátrium-klorid-oldatban!

Számítás:

$$C_{\text{Cl}} = \quad \text{mol dm}^{-3}$$

*Ha nem tudtad kiszámítani  $C_{\text{Cl}}$ -t,*

*a feladat hátralevő részében használd ezt:  $C_{\text{Cl}} = 0,010 \text{ mol dm}^{-3}$ !*

11. **Számítsd ki** a minimális  $V_{\text{Ag}}(\text{min})$  térfogatot, amikor a  $\text{AgCl}(\text{sz})$  kicsapódik!

Számítás:

$$V_{\text{Ag}}(\text{min}) = \quad \text{ml}$$

12. **Számítsd ki** az oldatban lévő kloridionok koncentrációját ( $[\text{Cl}^-]_{\text{res}}$ ) abban a pillanatban, amikor az ezüst-kromát elkezd kicsapódni! **Igazold** két érték összehasonlításával, miért jó indikátor a  $\text{CrO}_4^{2-}$  ion a végpont jelzésére!

Számítás:

$$[\text{Cl}^-]_{\text{res}} = \quad \text{mol dm}^{-3}$$

A  $\text{CrO}_4^{2-}$  jó indikátor a végpont jelzésére, mert...

| Feladat  | Kérdés | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8  | Össz |
|----------|--------|---|---|---|---|---|---|---|----|------|
| T4<br>7% | Max    | 6 | 9 | 8 | 5 | 6 | 2 | 2 | 12 | 50   |
|          | Pont   |   |   |   |   |   |   |   |    |      |

## T4 feladat: A lőportól a jódfelfedezéséig

A 19. században B. Courtois francia vállalkozó a lőpor készítésére használt **A** nitrát ( $\mathbf{M_A(NO_3)_m}$ ) gyártásába fogott. Ezt eredetileg Ázsiából hozták be, majd később az **A**-t a **B** ( $\mathbf{M_B(NO_3)_n}$ ) nitrátból állították elő cserebomlási reakcióban a **C** vegyület segítségével, amelyet algákból nyertek.

- Határozd meg** az **A** és **B** nitrátok képletét tudva azt, hogy mind a kettő alkáli-, illetve alkáliföldfém ( $\mathbf{M_A}$  és  $\mathbf{M_B}$ ) vízmentes sója. Az egyik nitrátminta 1 tömegszázaléknál nem több nemfém-szennyeződést, míg a másik minta  $9 \pm 3$  tömegszázaléknyi szennyeződést tartalmaz. Az  $\mathbf{M_A}$  és  $\mathbf{M_B}$  fémtartalom a mintákban 38,4 tömegszázalék, illetve 22,4 tömegszázalék volt. A válaszodat számítással is **támaszd alá!**

**A:**

**és B:**



Az **A** előállításához 262,2 g szilárd **C** vegyületet adtak egy 442,8 g **B**-t tartalmazó oldathoz. Ekkor **B** vegyület volt feleslegben. Ennek eredményeként 190,0 g **D** fehér csapadék keletkezett, amelyet szűréssel távolítottak el. A szűrletet bepárolták és a kapott **E** szilárd keveréket addig hevítették, amíg a minta tömege állandóvá nem vált (ekkor csak nitrítet,  $\text{NO}_2^-$ , tartalmazott). A hevítéskor keletkező egyetlen gázhalmazállapotú termék a dioxid volt:  $60,48 \text{ dm}^3$   $0^\circ\text{C}$ -on és 1 atm-án (a dioxid ideális gáznak tekinthetjük).

2. **Számítsd ki** az **E** keverék összetételét (tömegszázalékban) feltételezve, hogy csak az **A** és **B** vegyületet tartalmazza, semmilyen szennyeződést nem, és hogy **C**-t tiszta vízmentes állapotban adták hozzá!

tömegszázalék **A**:

tömegszázalék **B**:

3. **Határozd meg** a **C** és **D** vegyületek képletét, és **írd le** a **B** és **C** között végbemenő kémiai reakció rendezett egyenletét!

**C:**

**és D:**

A **B** és **C** reakciójának egyenlete:

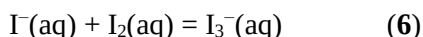
1811-ben, miközben algahamuval dolgozott, Courtois észrevette, hogy a használt rézedények a szokásosnál gyorsabban kopnak el. Miközben ezt a jelenséget vizsgálta, a macskája bejött a laboratóriumba és tömény kénsavoldatot borított a száraz algahamura. Ekkor hirtelen ibolya gőzök törtek elő az edényből (**1**, a kénsav erős oxidálószer). Így fedezték fel a jódot ( $I_2$ )! A jód okozta a réz korrózióját (**2**) is. Mindenesetre Courtois a jód orvosi alkalmazásai miatt új üzemet nyitott, amely a jódot algák és klór reakciójával állította elő (**3**).

Manapság a jódot többféle reakciópartner ( $NO_3^-$ ,  $I^-$ ,  $H^+$ ) (**4**) vagy ( $IO_3^-$ ,  $I^-$ ,  $H^+$ ) (**5**) felhasználásával állítják elő.

4. **Írd le** az **1–5.** reakciók rendezett egyenletét!

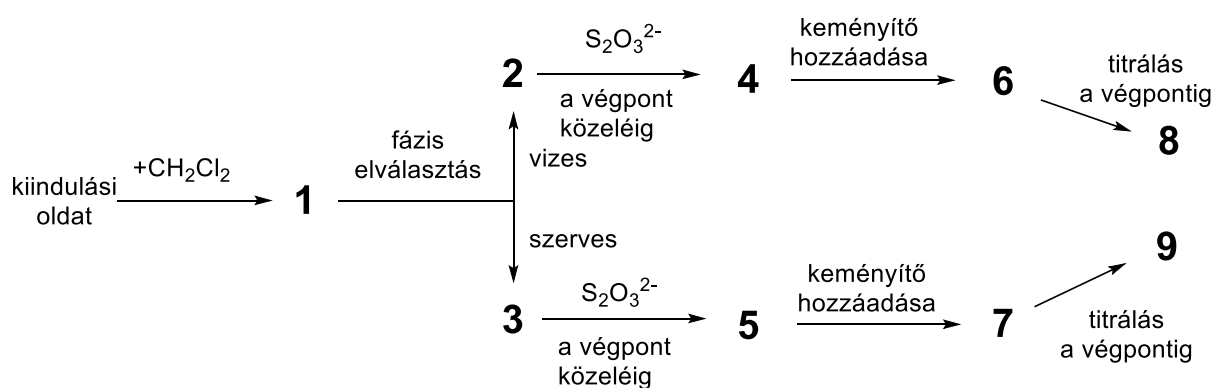
|          |
|----------|
| <b>1</b> |
| <b>2</b> |
| <b>3</b> |
| <b>4</b> |
| <b>5</b> |

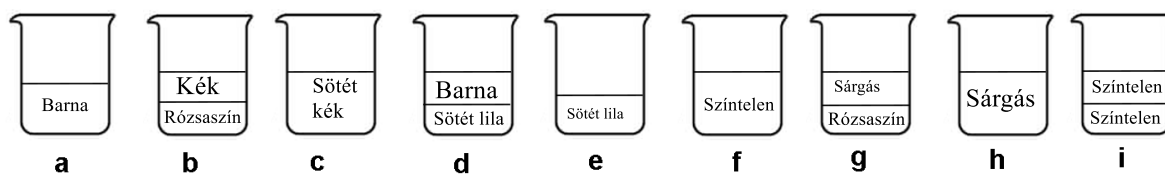
A jód vízoldhatósága nagyon kicsi, de jodidionok hozzáadásával jelentősen megnövekszik. Ekkor ugyanis trijodidionok ( $I_3^-$ ) keletkeznek:



A **(6)** egyensúly a  $I_2$ -ot diklórmetánnal extrahálva tanulmányozható. Valójában a  $I^-$  és a  $I_3^-$  nem oldódik szerves oldószerekben, de a  $I_2$  igen. Extrakció esetén 15-ször nagyobb a jód koncentrációja diklórmetánban, mint vízben.

A következő kísérletet végeztük el. Kiindulási oldatot készítettünk úgy, hogy néhány jódkristályt oldottunk 50,0 ml olyan vizes oldatban, amely 0,1112 g kálium-jodidot tartalmazott. Ezután 50,0 ml diklórmetánt adtunk hozzá, és a keveréket örülden ráztuk az egyensúly kialakulásáig. A fázisok szétválasztása után mindkét fázist megtitráljuk: keményítő jelenlétében 16,20 ml (szerves fázis) és 8,00 ml (vizes fázis) mérőoldat fogyott. A mérőoldat 1,000 litere 14,9080 g nátrium-tioszulfát pentahidrátból készült. A folyamatot sematikusan az alábbi ábra mutatja:





5. **Feleltesd meg** a sémán látható állapotokat (1–9) az azokat szimbolizáló vázlatos képeknek (a–i).

| Állapot  | Kép |
|----------|-----|
| <b>1</b> |     |
| <b>2</b> |     |
| <b>3</b> |     |
| <b>4</b> |     |
| <b>5</b> |     |
| <b>6</b> |     |
| <b>7</b> |     |
| <b>8</b> |     |
| <b>9</b> |     |

6. **Írj** két rendezett egyenletet a vizes fázisban jelen lévő jódspecieszek és a tioszulfát között a titrálás során lejátszódó reakcióra!

7. **Számítsd ki** a kezdeti oldat készítéséhez felhasznált jódtömegét!

$$m(\text{I}_2) = \quad \text{g}$$

8. **Számítsd ki** a (6) reakció egyensúlyi állandóját  $K^\circ$ !

$$K^\circ =$$

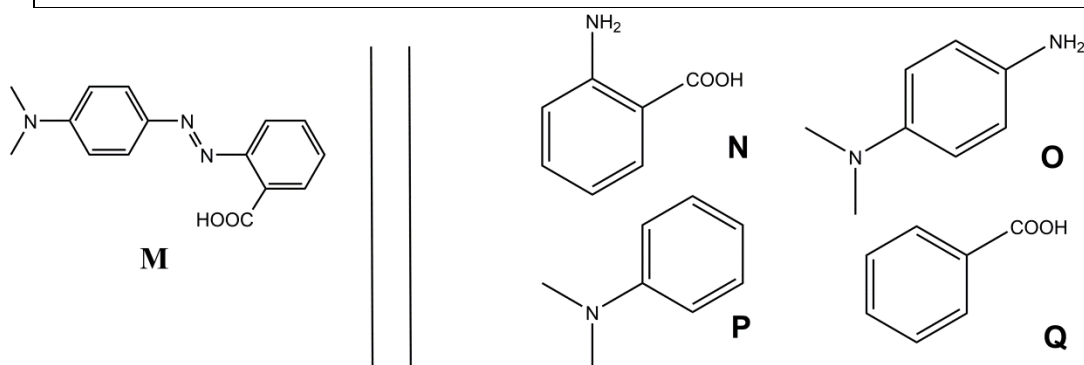
| T5 feladat<br>8% | Kérdés | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | Össz |
|------------------|--------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|------|
|                  | Max    | 3 | 4 | 4 | 2 | 5 | 5 | 4 | 3 | 5 | 2  | 2  | 2  | 41   |
|                  | Pont   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |    |    |    |      |

## T5 feladat: Nanogépek azobenzol – $\beta$ -ciklodextrin komplexekkel

A nanogépek olyan molekuláris struktúrák, amelyek lehetővé teszik egy energiaforrás energiájának nanoméretű mozgássá alakítását, és ezáltal pl. hatóanyagok célbajuttatását oldják meg. Sok nanogép az azovegyületek ( $R-N=N-R'$ ) fény hatására lejátszódó izomerizációját használja fel.

- Rajzold le** az azobenzol ( $H_5C_6-N=N-C_6H_5$ ) sztereoizomereit, és **rajzold** egy vonalat azok között a szénatomok között, amelyek egymástól a legtávolabb vannak a két szerkezetben! **Hasonlítsd össze** a két távolságot ( $d_{transz}$  és  $d_{cisz}$ )!

|                  |             |
|------------------|-------------|
| <i>transz</i>    | <i>cisz</i> |
| Összehasonlítás: |             |
| $d_{transz}$     | $d_{cisz}$  |



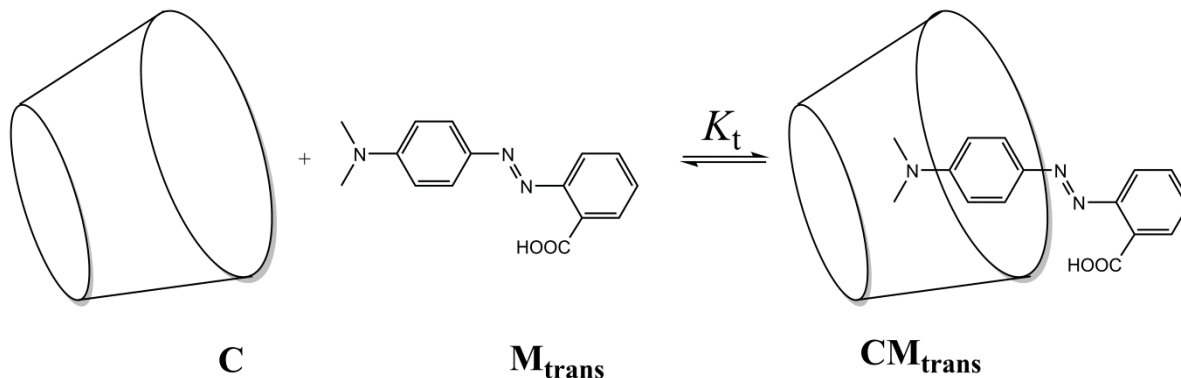
1. ábra – Számításba vehető reagensek az **M** előállítására

- Az **M** két lépésben előállítható az 1. ábrán található egyszerű reagensekből. **Válaszd ki** közülük (**N - Q**) azokat, amelyekkel **M** nagyon nagy regioszelektivitással előállítható. A szintézis első lépésében nátrium-nitritet ( $NaNO_2$ ) használnak reagensként hideg sósavas oldatban.

Reagensek: \_\_\_\_\_ és \_\_\_\_\_

### Az asszociáció $K_t$ egyensúlyi állandójának meghatározása

A  $\beta$ -ciklodextrin (**C**, 2. ábra) a glükóz gyűrűs heptamerje, ami az azovegyületekkel zárványkomplexezt tud képezni. A 3-6 kérdésben spektroszkópia segítségével fogjuk a transz izomer **CM<sub>trans</sub>** zárványkomplexeztnek 2. ábrán látható képződéséhez tartozó egyensúlyi állandót meghatározni.



2. ábra – A **CM<sub>trans</sub>** zárványkomplex képződése

Több oldatot készítünk **C** és **M<sub>trans</sub>** oldásával. A kezdeti koncentrációk  $[C]_0$  és  $[M_{trans}]_0$ . Az  $[M_{trans}]_0$  megegyezik minden oldatra, viszont  $[C]_0$  változik. Egy adott hullámhosszon követjük az egyes oldatok és a tiszta **M<sub>trans</sub>** oldat abszorbanciájának  $\Delta A$  különbségét. A két anyag moláris abszorpciós koefficiensét  $\epsilon_{CMtrans}$  és  $\epsilon_{Mtrans}$  jelöli.  $L$  az optikai úthossz. A **C** abszorbanciája ( $\epsilon_C$ ) elhanyagolható.

3. **Mutasd meg**, hogy  $\Delta A = \alpha \cdot [CM_{trans}]$  és **fejezd ki**  $\alpha$ -t ismert állandó(k) segítségével!

Levezetés:

$$\alpha =$$

4. **Mutasd meg**, hogy ha **C** nagy feleslegben van **M<sub>trans</sub>**-hoz viszonyítva ( $[C]_0 \gg [M_{trans}]_0$ ), akkor a **C** koncentrációját állandónak lehet tekinteni,  $[C] \approx [C]_0$ .

Levezetés:

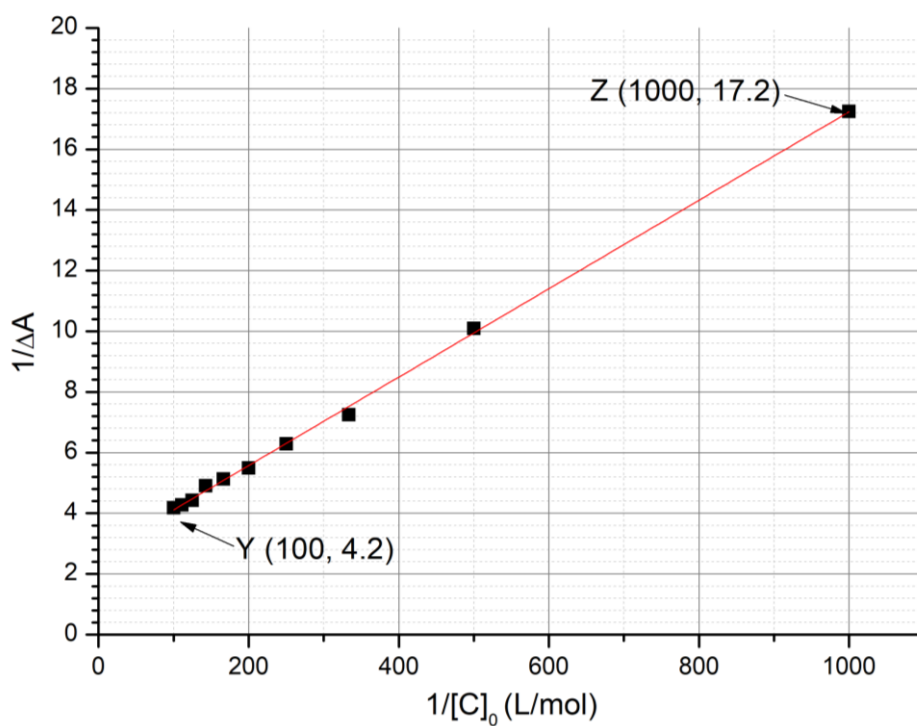
5. **Mutasd meg**, hogy ha **C** nagy feleslegben van **M<sub>trans</sub>**-hoz viszonyítva ( $[C]_0 \gg [M_{trans}]_0$ ), akkor  $\Delta A = \alpha \cdot \frac{\beta \cdot [C]_0}{1 + K_t \cdot [C]_0}$ , és **fejezd ki**  $\beta$ -t állandó(k) és kezdeti koncentráció(k) függvényében!

Levezetés:

$$\beta =$$



6. **Határozd meg**  $K_t$  értékét a következő kísérleti diagram (3. ábra) segítségével!



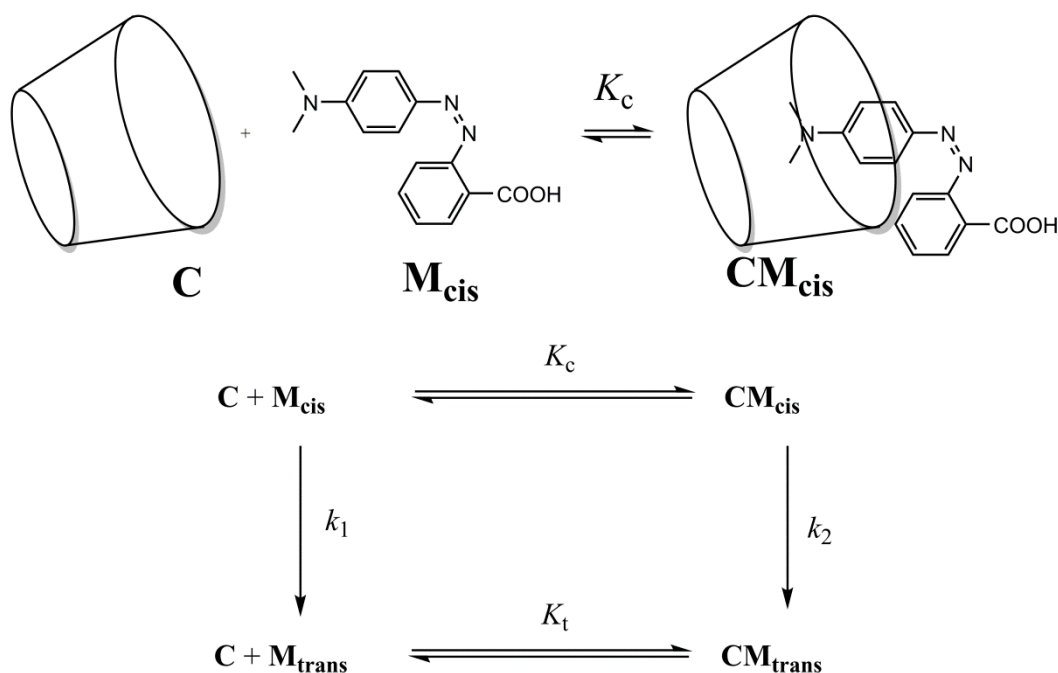
3. ábra – Az  $1/\Delta A$  függése  $1/[C]_0$ -tól

Számolás:

$$K_t =$$

### Az asszociáció $K_c$ egyensúlyi állandójának meghatározása

A 7-9 kérdésben kinetikus módszerrel határozzuk meg a  $\mathbf{M}_{\text{cis}}$  cisz izomer  $\mathbf{CM}_{\text{cis}}$  zárványkomplexének képződéséhez tartozó  $K_c$  egyensúlyi állandót. Egy csak  $\mathbf{M}_{\text{trans}}$ -ot tartalmazó mintát besugároznak, és így ismert mennyiségű  $\mathbf{M}_{\text{cis}}$  keletkezik  $[\mathbf{M}_{\text{cis}}]_0$  koncentrációban. Az  $\mathbf{M}_{\text{cis}}$  (a szabad vagy a zárványkomplexben) eztán termikus izomerizáció során  $\mathbf{M}_{\text{trans}}$ -szá alakul.  $\mathbf{C}$  távollétében az izomerizáció elsőrendű kinetikát követ, aminek a sebességi állandója  $k_1$ . A komplexek képződésének egyensúlyai gyorsabbak, mint az izomerizáció. A kísérlet kinetikai lépéseinek vázlatát a 4. ábra mutatja.



4. ábra – Az  $\mathbf{M}_{\text{cis}}$   $\mathbf{C}$  jelenlétében lejátszódó izomerizációjának lépései

Az  $\mathbf{M}_{\text{cis}}$  teljes (szabad és komplexált) mennyiségének  $r$  fogyási sebességét így definiálhatjuk:

$$r = k_1[\mathbf{M}_{\text{cis}}] + k_2[\mathbf{CM}_{\text{cis}}]$$

A kísérletekben  $r$  látszólagos elsőrendű kinetikát követ, aminek a látszólagos sebességi állandója  $k_{\text{obs}}$ :

$$r = k_{\text{obs}}([\mathbf{M}_{\text{cis}}] + [\mathbf{CM}_{\text{cis}}])$$

7. **Mutasd meg** hogy  $k_{\text{obs}} = \frac{\gamma + \delta \cdot k_2[\mathbf{C}]}{1 + K_c[\mathbf{C}]}$ , és **fejezd ki**  $\gamma$ -t és  $\delta$ -t ismert állandó(k) segítségével.

Levezetés:

$$\gamma =$$

és

$$\delta =$$

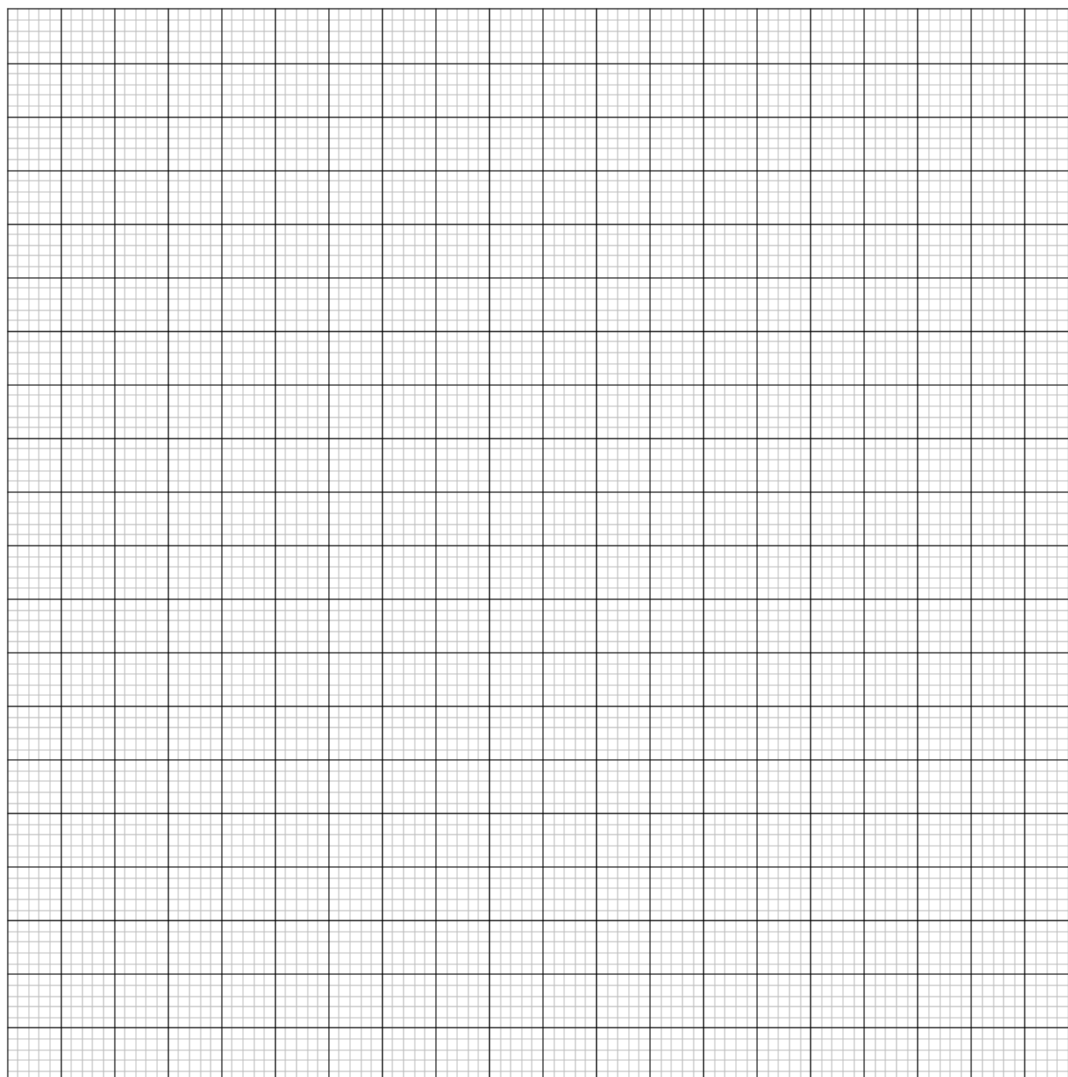
8. **Válaszd ki**, hogy milyen további feltétel(ek) esetén fejezhető ki a  $k_{\text{obs}}$ -hoz tartozó  $t_{1/2}$  felezési idő úgy, mint  $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\gamma} (1 + K_c[\text{C}]_0)$  ha tudjuk, hogy  $[\text{C}]_0 \gg [\text{M}_{\text{cis}}]_0$ . **Adj** válaszodat magyarázó levezetést!

- ☐ Az  $\text{M}_{\text{cis}}$  nagyon lassan izomerizálódik a ciklodextrinben.
- ☐ A szabad  $\text{M}_{\text{cis}}$  nagyon lassan izomerizálódik.
- ☐ A  $\text{CM}_{\text{cis}}$  nagyon stabil.
- ☐ A  $\text{CM}_{\text{trans}}$  nagyon stabil.

Indoklás:

9. Feltételezve, hogy a 8. kérdés feltétele(i) teljesülnek, **határozd meg**  $K_c$ -t lineáris regresszióval az alábbi adatokat használva! Csinálhatod a számológéppel vagy grafikonnal is.

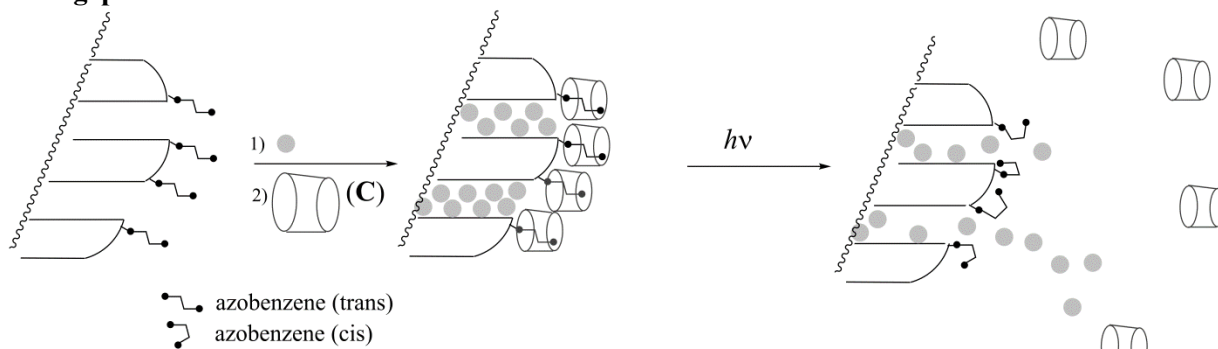
| $[C]_0$ (mol dm <sup>-3</sup> ) | $t_{1/2}$ (s) | $[C]_0$ (mol dm <sup>-3</sup> ) | $t_{1/2}$ (s) |
|---------------------------------|---------------|---------------------------------|---------------|
| 0                               | 3,0           | $3,0 \cdot 10^{-3}$             | 5,9           |
| $1,0 \cdot 10^{-4}$             | 3,2           | $5,0 \cdot 10^{-3}$             | 7,7           |
| $5,0 \cdot 10^{-4}$             | 3,6           | $7,5 \cdot 10^{-3}$             | 9,9           |
| $1,0 \cdot 10^{-3}$             | 4,1           | $1,0 \cdot 10^{-2}$             | 12,6          |



A regresszió egyenlete:

$$K_c =$$

## Nanogépek előállítása



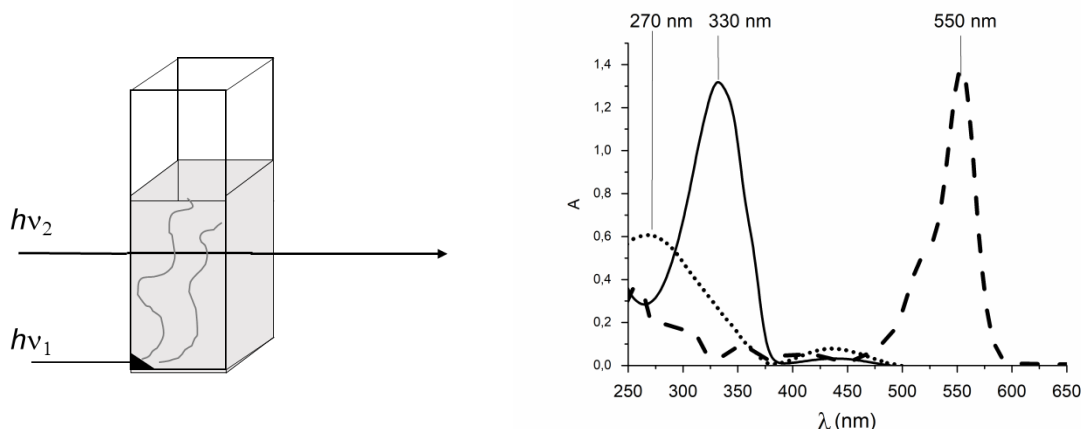
5. ábra – Az azobenzol-ciklodextrin zárványkomplex fényindukált elbomlása, ami festékanyag (szürke körök) felszabadulását eredményezi.

Egy másik azobenzolszármazékot (amire  $K_c \ll K_t$ ), és ami kezdetben *transz* formában van, kovalensen rákapcsolják porózus szilika felületére (5. ábra). A pórusokat festékkel (rodamin B, szürke körök az 5. ábrán) töltik fel. C-t hozzáadva, zárványkomplex keletkezik, ami elzárja a pórusokat, és megakadályozza a festékanyag felszabadulását.

10. **Válaszd ki** a legmegfelelőbb feltételt (csak egyet) úgy, hogy a pórusok legyenek lezárva C jelenlétében, és a festékanyag besugárzásra szabaduljon fel!

- ☐  $K_t \gg 1$   
☐  $K_t \gg 1$  és  $K_c \ll 1$   
☐  $K_t / K_c \ll 1$   
☐  $K_t \gg 1$  és  $K_c \gg 1$   
☐  $K_c \ll 1$

Ez a festékanyaggal telített azobenzolos-szilikapor egy kuvetta sarkába kerül (6. ábra) úgy, hogy a por nem kerülhet oldatba. A port a  $\lambda_1$  hullámhosszon besugározzák, hogy a festék felszabaduljon a pórusokból (5. ábra). A felszabadulást abszorpciós spektroszkópiával követik nyomon, és az oldat abszorbanciáját a  $\lambda_2$  hullámhosszon mérik.



6. ábra – Bal oldal: a kísérleti elrendezés, amivel a festékanyag felszabadulását követik; jobb oldal: a használt *transz*-azobenzolszármazék (folytonos), *cisz*-azobenzolszármazék (pöttyözött vonal) és a rodamin B (szaggatott vonal) abszorpciós spektruma

11. **Azonosítsd**  $\lambda_1$ -et!

$\lambda_1 =$             nm

12. Azonosítsd  $\lambda_2$ -t!

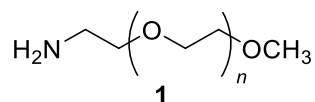
$\lambda_2 =$             nm

| T6 feladat<br>8% | Kérdés | 1 | 2 | 3 | 4 | 5  | 6 | 7 | 8 | 9 | Össz |
|------------------|--------|---|---|---|---|----|---|---|---|---|------|
|                  | Max    | 4 | 4 | 5 | 3 | 10 | 2 | 9 | 6 | 5 | 48   |
|                  | Pont   |   |   |   |   |    |   |   |   |   |      |

## T6 feladat: Blokk-kopolimer jellemzése

A blokk-kopolimereket különböző polimerek (blokkok) összekapcsolásával állítják elő, így számos egyedi tulajdonságuk, pl. önszerveződő képességük is lehet. Ebben a feladatban ilyen makromolekulák szintézisét és jellemzését fogjuk tanulmányozni.

### Az első blokk vizsgálata



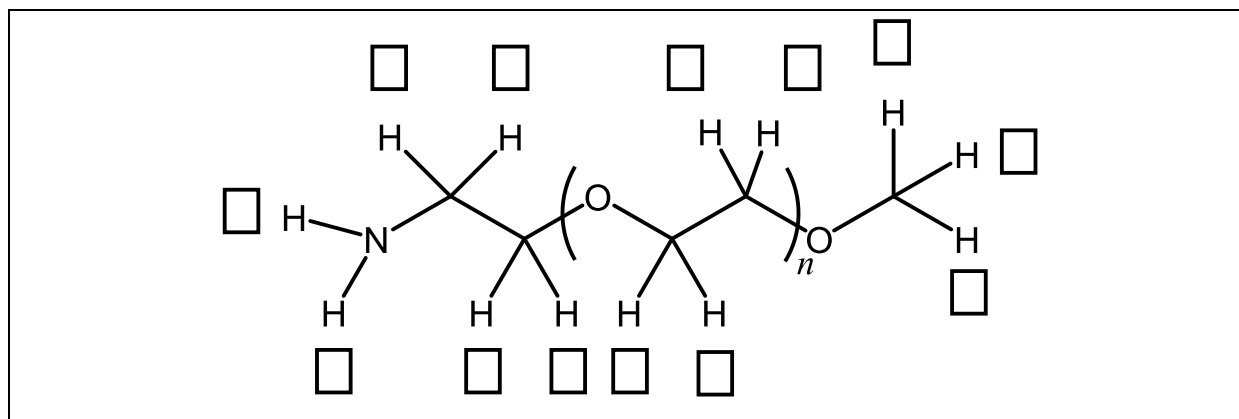
Ebben az első részben, az **1** ( $\alpha$ -metoxi- $\omega$ -amino-polietilén-glikol) vízoldható homopolimert fogjuk tanulmányozni.

Az **1**  $^1\text{H}$ -NMR spektruma ( $\text{DMSO}-d_6$ ,  $60^\circ\text{C}$ , 500 MHz) a következő jeleket tartalmazza:

| jelölés | $\delta$ (ppm) | integrál érték |
|---------|----------------|----------------|
| a       | 2,7*           | 0,6            |
| b       | 3,3            | 0,9            |
| c       | 3,4            | 0,6            |
| d       | $\sim 3,5$     | 133,7          |

1. táblázat, \*  $\text{D}_2\text{O}$  jelenlétében a 2,7 ppm-es jel eltűnik.

1. **Melyik** protonok tartoznak az 1. táblázatban feltüntetett  $^1\text{H}$ -NMR jelekhez (a, b, c, d)?



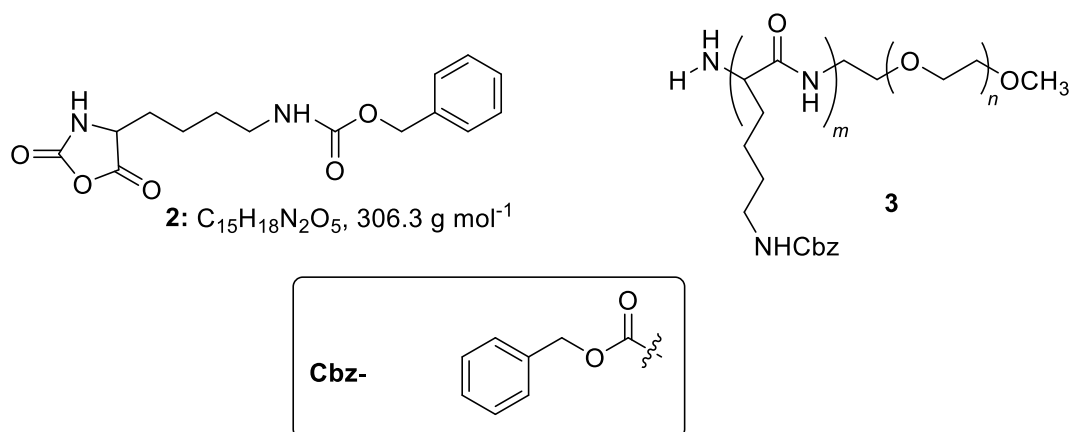
2. **Fejezd ki** az átlagos polimerizációfokot ( $n$ ) az ismétlődő egység NMR jel integrál értékét ( $A_{\text{OC}_2\text{H}_4}$ ) és a metil végcsoport NMR jel integrál értékét ( $A_{\text{OCH}_3}$ ) is felhasználva! **Számítsd ki**  $n$ -t!

$$n =$$

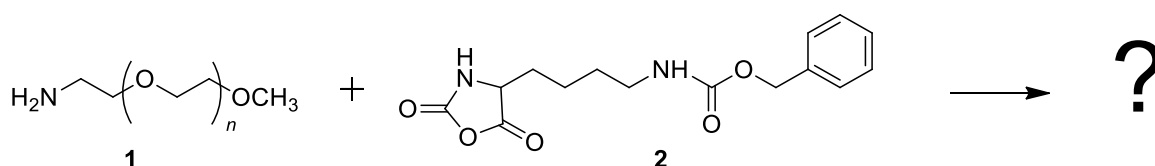
*Ha nem tudod kiszámítani az  $n$ -t,  $n = 100$  értéket használj a feladat további részében!*

### A diblokk-kopolimer vizsgálata

A kopolimer második blokkjának szintéziséhez az **1**-t reagáltatjuk **2**-vel ( $\epsilon$ -(benziloxikarbonil)-lizin-*N*-karboxianhidriddel). Így kapjuk a **3** blokk-kopolimert.



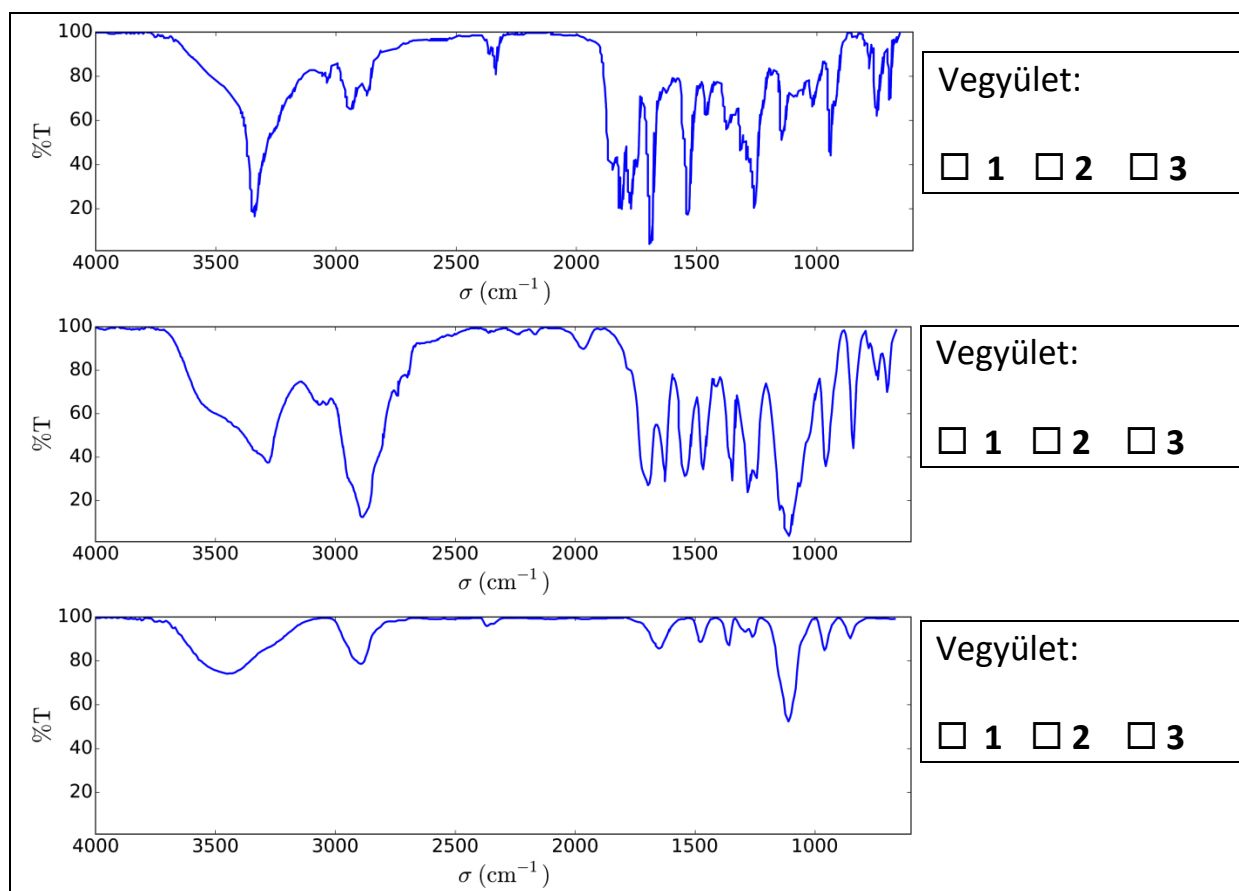
3. **Rajzold le** annak az intermedierek a szerkezetét, ami az **1** vegyület **2**-re történő addíciójának első lépésében keletkezik! A reakció második lépésében egy gáz (**G**) is képződik. **Rajzold le** a szerkezetét!



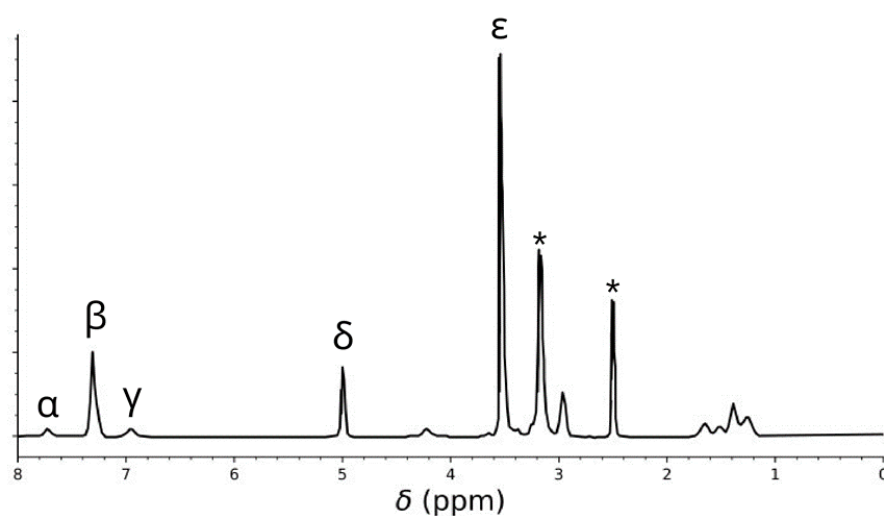
**G:**



4. A vegyületek jellemzéséhez IR méréseket végeztünk. **Melyik** IR spektrum melyik vegyülethez (1, 2 és 3) tartozik?

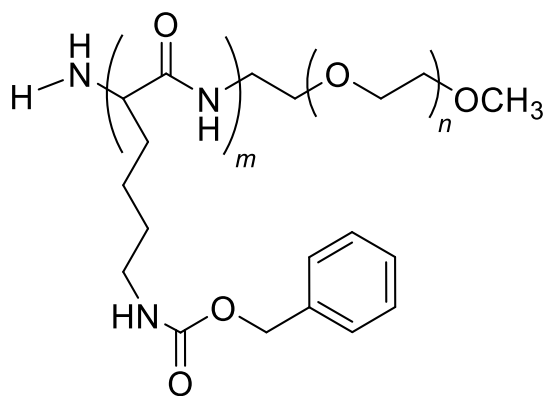


5. A 3 kopolimer  $^1\text{H}$ -NMR spektrumát (DMSO- $d_6$ -ban, 60 °C-on, 500 MHz) az 1. ábra mutatja. Az integrál értékek a 2. táblázatban vannak. Néhány vagy az összes NMR jelet használva **számítsd ki** a számátlag moláris tömeget ( $M_n$ ) a 2. kérdésben kapott  $n$  értéket is felhasználva! A számításokhoz **karikázd be** a szerkezeten az(ok)at az atomcsoport(ka)t, amelyeket használtál, és **jelöld** őket a megfelelő szimbólummal/szimbólumokkal ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,...)!



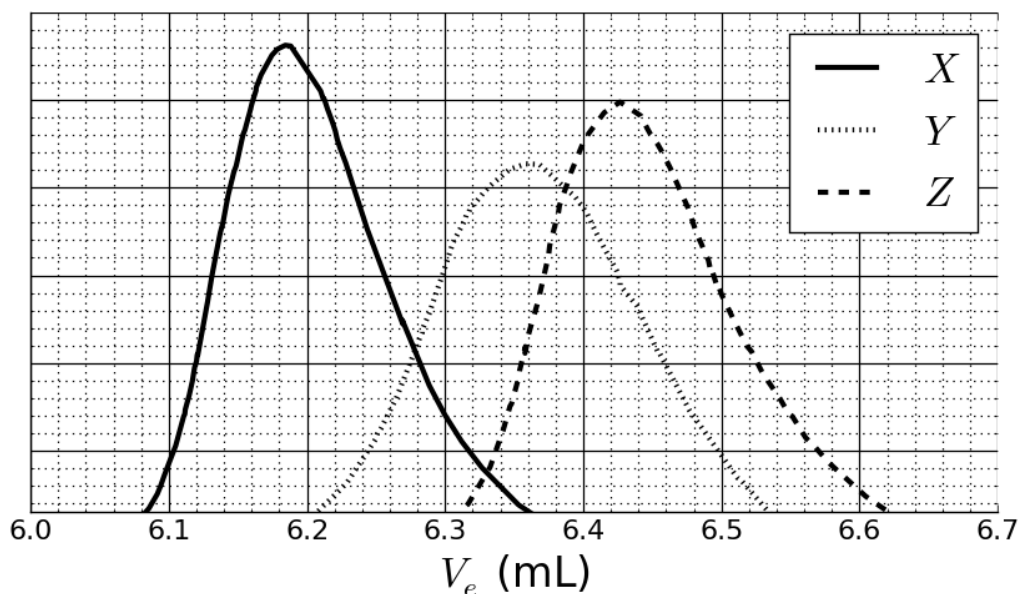
2. táblázat

| jel        | integrál |
|------------|----------|
| $\alpha$   | 22.4     |
| $\beta$    | 119      |
| $\gamma$   | 23.8     |
| $\delta$   | 47.6     |
| $\epsilon$ | 622      |



$M_n =$  kg mol<sup>-1</sup>  
A válaszodat két tizedes pontossággal add meg.

Az **1** vegyületet **2**-vel 40 °C-on reagáltatva 20 h után a **3a**, 25h után a **3b** és 30 h után a **3c** kopolimereket kapták. Az elvégzett méretkizárásos kromatográfia (size-exclusion chromatography, SEC) eredményeit a 2. ábra mutatja.



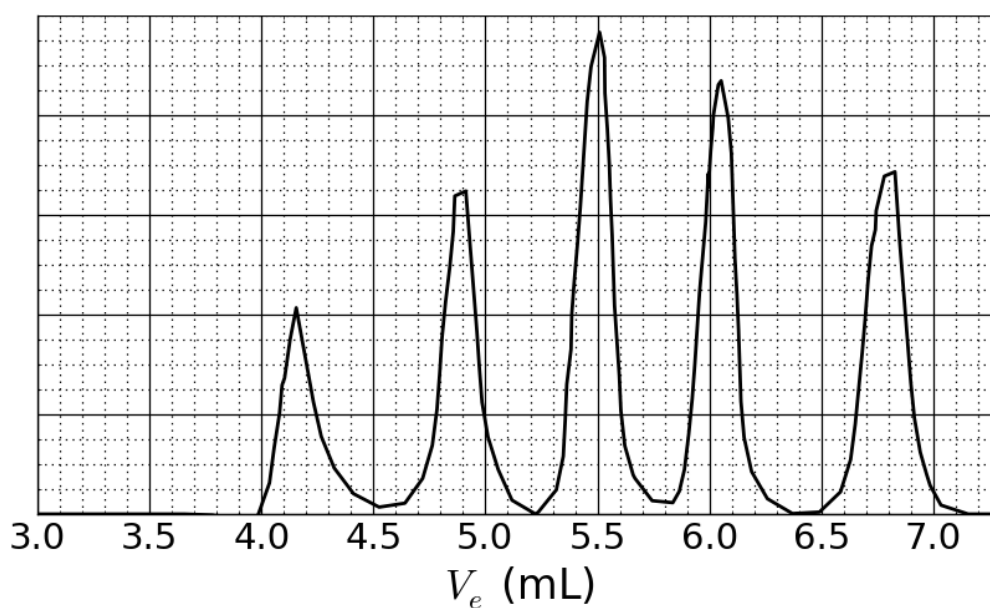
2. ábra – A **3a**, **3b** és **3c** SEC kromatogramja az elúciós térfogat függvényében,  $V_e$ .

6. **Párosítsd** a 2. ábrán látható jeleket a **3a**, **3b** és **3c** kopolimerekkel!

|            |                            |                            |                            |
|------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|
| <b>3a:</b> | <input type="checkbox"/> X | <input type="checkbox"/> Y | <input type="checkbox"/> Z |
| <b>3b:</b> | <input type="checkbox"/> X | <input type="checkbox"/> Y | <input type="checkbox"/> Z |
| <b>3c:</b> | <input type="checkbox"/> X | <input type="checkbox"/> Y | <input type="checkbox"/> Z |

A kromatogram kalibrációjához egy ismert tömegű polimerekből (3, 30, 130, 700 és 7000 kg mol<sup>-1</sup>) álló standard elegyet is vizsgáltunk (3. ábra).

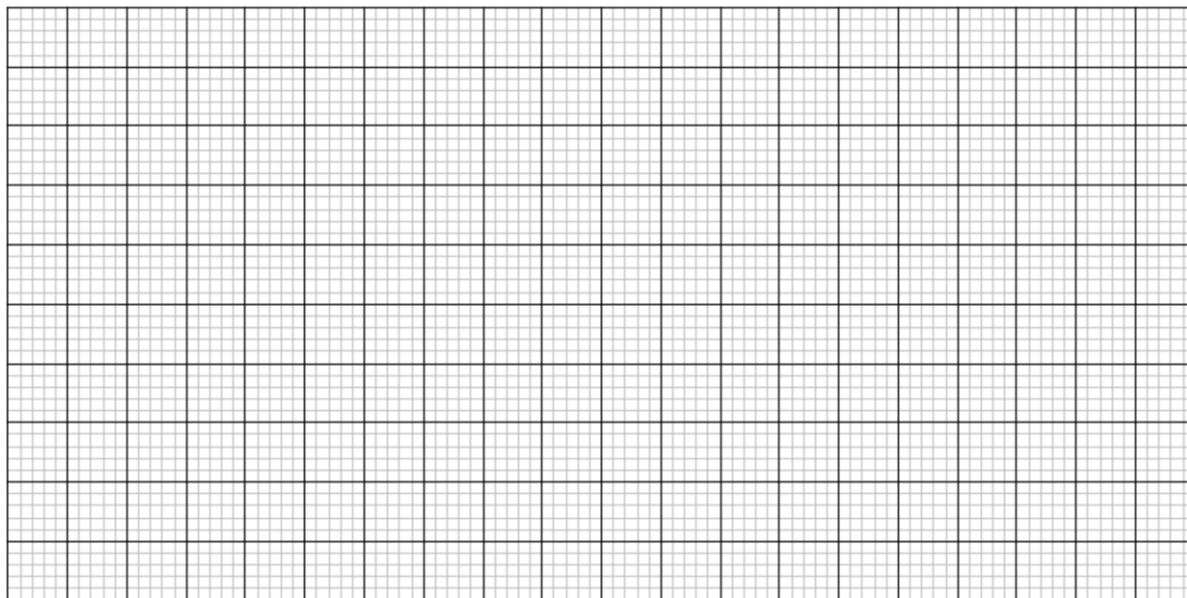
A moláris tömeg logaritmusa egyenesen arányos az elúciós térfogattal ( $V_e$ ).



3. ábra – A standard keverék SEC kromatogramja.

7. A 2. és 3. ábrán látható SEC görbék alapján **határozd meg** az X jelű görbéhez tartozó polimer elúciós térfogatát ( $V_e$ ), és ezt használva **becsüld meg** a második blokk polimerizációfokát ( $m$ )! **Írd le** a számításodat részletesen; használhatsz számológépet vagy rajzolj grafikont!

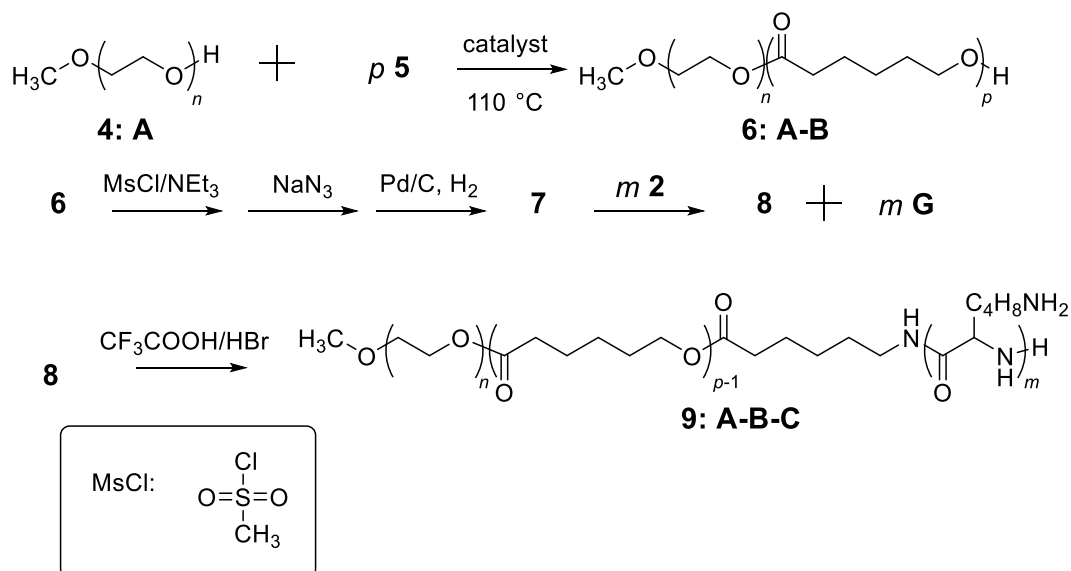
$V_e =$                       mL



$m =$

## A triblokk-kopolimer előállítása

A biológiai alkalmazáshoz, beleértve a micellaképzést is, a **9** triblokk-kopolimert állítottuk elő úgy, hogy a **B** középső blokk kiépítéséhez az **5** monomert használtuk.



8. **Rajzold le** az **5**, **7** és **8** vegyületek szerkezetét!

**5** (nincs más termék, csak a **6:A-B** keletkezik)

**7** (gáz fejlődik az utolsó lépésben)

**8**

9. Az amfifil blokk-kopolimereket, mint amilyen a **9: A-B-C**, gyógyászati célokra is használják. Ugyanis önszerveződő micellákat képeznek vízben (pH = 7), amik hatóanyaghordozók lehetnek.

**Jelöld** a kopolimer egyes blokkjainak tulajdonságát! **Rajzold le** egy 4 polimer láncból keletkező micella sematikus vázlatát!

|           |                                   |                                   |
|-----------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| <b>A:</b> | <input type="checkbox"/> hidrofób | <input type="checkbox"/> hidrofil |
| <b>B:</b> | <input type="checkbox"/> hidrofób | <input type="checkbox"/> hidrofil |
| <b>C:</b> | <input type="checkbox"/> hidrofób | <input type="checkbox"/> hidrofil |

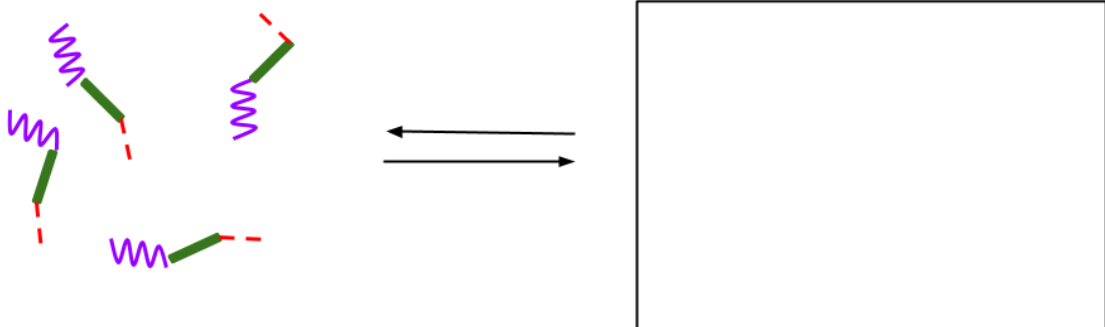
  

**A** 

**B** 

**C** 

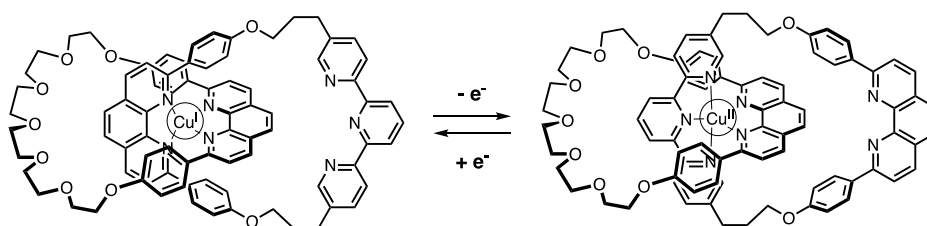
  



## T7 feladat: Gyűrűk táncoltatása [2]katenánban

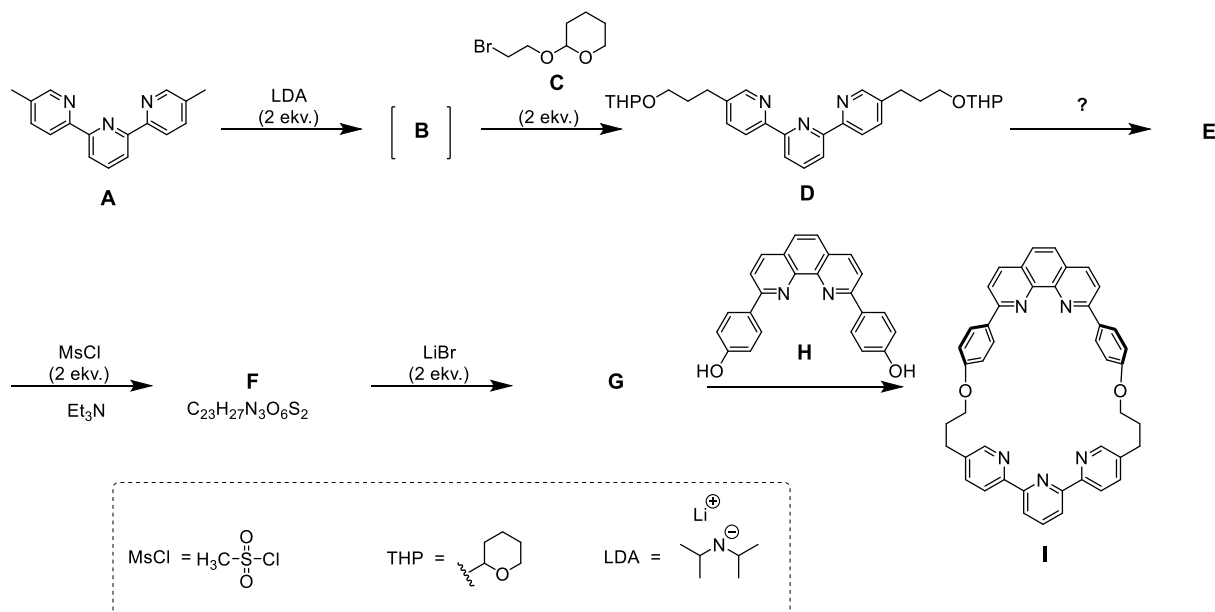
| T7 feladat<br>6% | Kérdés | 1 | 2  | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | Össz |
|------------------|--------|---|----|---|---|---|---|---|---|---|----|----|------|
|                  | Max    | 4 | 12 | 2 | 2 | 2 | 5 | 5 | 8 | 4 | 5  | 5  | 54   |
|                  | Pont   |   |    |   |   |   |   |   |   |   |    |    |      |

2016-ban a kémiai Nobel-díjat J.-P. Sauvage, Sir J. F. Stoddart és B. L. Feringa kapta „molekuláris gépek tervezésért és előállításáért”. Ezek egy példája a [2]katenán, egy két összefűzött gyűrűből álló molekula. Egy ilyen rendszerben az egyik makrociklus egy fenantrolin ligandum részletet (kétfogú), míg a másik egy fenantrolin és egy terpiridin (háromfogú) ligandum részletet tartalmaz. A rézion mind a két gyűrűből csak egy ligandummal képez komplexet. A réz oxidációs állapotától (+I vagy +II) függően két térszerkezetet létezik. (1. ábra)



1. ábra – A gyűrű multistabilitása a [2]katenánban

A makrociklus szintézise a következő:



1. **Rajzold le** a **B** szerkezetét!

**B**

2. **Rajzold le E, F és G szerkezetét!**

**E**

**F**

**G**

3. Az alábbi reakciókörülmények közül, **mely(ek)** alkalmas(ak) **E** előállítására **D**-ből?

- ☐  $\text{H}^+$ ,  $\text{H}_2\text{O}$
- ☐  $\text{OH}^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$
- ☐  $\text{NaBH}_4$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$
- ☐  $\text{H}_2$ ,  $\text{Pd/C}$ , THF

4. A szintézisekben a  $\text{MsCl}$ -t minek a kialakítására használják?

- ☐ távozócsoporthoz
- ☐ védőcsoporthoz
- ☐ dezaktiválócsoporthoz
- ☐ irányítócsoporthoz

5. **F**-et  $\text{LiBr}$ -dal reagáltatjuk acetonban, és **G**-t kapunk. Ez a reakció egy

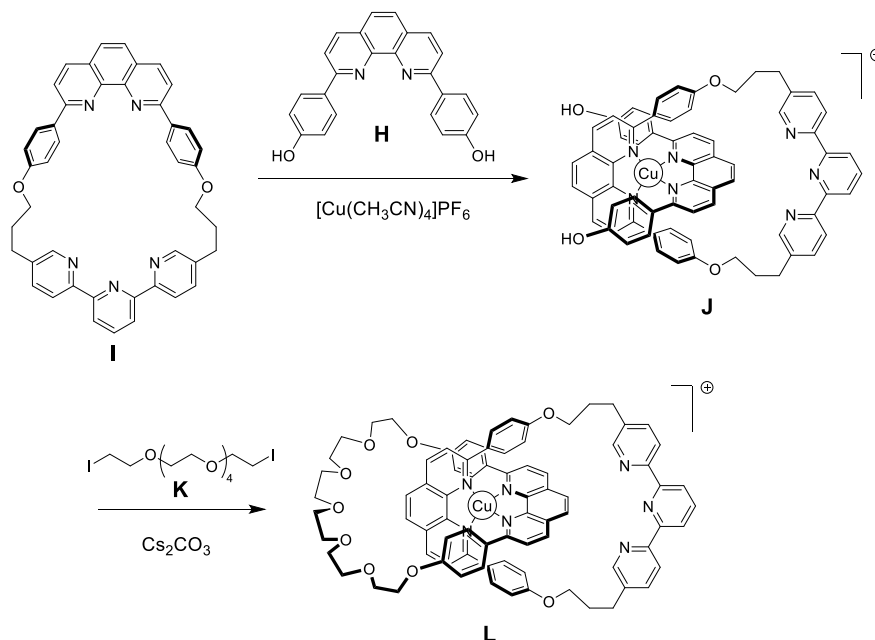
- ☐ elektrofil aromás szubsztitúció.
- ☐ nukleofil aromás szubsztitúció.
- ☐  $\text{S}_{\text{N}}1$ .
- ☐  $\text{S}_{\text{N}}2$ .



6. **Rajzold le** az **F** → **G** átalakítás sebességhatározó lépésének az átmeneti állapotát, a rajzod mutassa a 3D geometriáját is! Csak egy reakciócentrumot ábrázolj! A fő szénláncot R csoportként rövidítsd!

Átmeneti állapot:

Az **L**-vel jelölt [2]katenán előállításához kihasználják egy réz-komplex templáthatását:



7. **Írd le** az alapállapotú  $\text{Cu}(0)$  teljes elektronkonfigurációját! Add meg a Cu oxidációs számát a **J** komplexben, és írd le a **J**-nek megfelelő szabad rézion elektronkonfigurációját!

a  $\text{Cu}(0)$  elektronkonfigurációja:

a Cu oxidációs száma **J**-ben:

a Cu elektronkonfigurációja **J**-ben:

8. **Milyen** a geometriája a rézionnak az **L**-ben? Tegyük fel, hogy a réz körül a ligandumok az ideális geometriában helyezkednek el. **Rajzold le** a kristálytér által befolyásolt d pályák pályaenergia szintjeit! **Töltsd fel** a pályadiagramot! Add meg ennek a komplexnek a maximális spin ( $S$ ) értékét!

A Cu körül a geometria az **L**-ben:

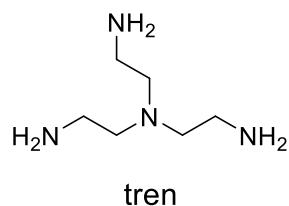
- ☐ oktaéderez  
☐ tetraéderez  
☐ síknégyszetes  
☐ trigonális bipiramisos

A d pályák felhasadása és betöltöttsége:

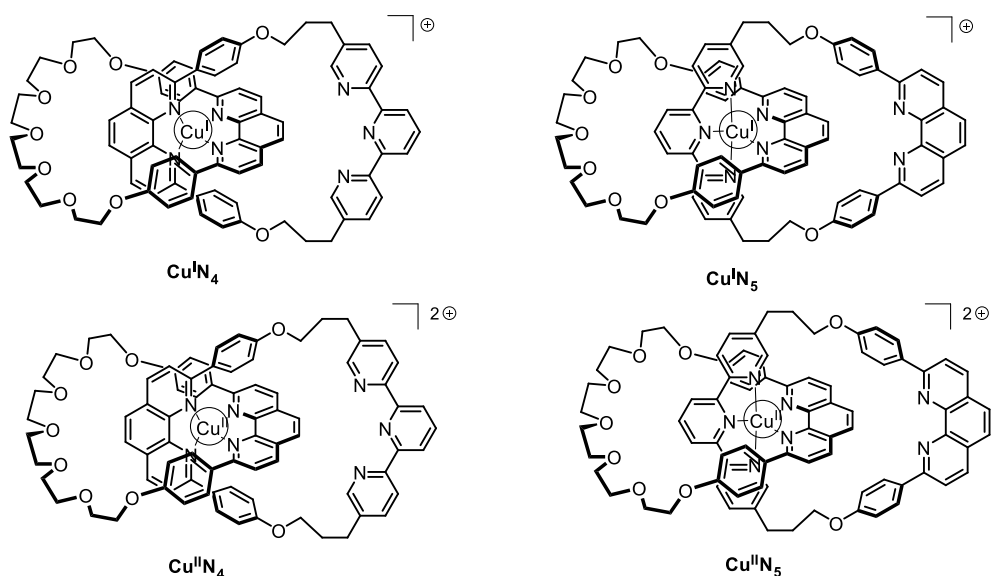
$S =$

9. Az alábbi vegyületek közül, mely(ek) alkalmasak a rézionok **L**-ből történő eltávolítására, és így a szabad [2]katenán előállítására:

- ☐  $\text{CH}_3\text{CN}$   
☐  $\text{NH}_4\text{PF}_6$   
☐  $\text{KCN}$   
☐ tren



Az [2]katenánban (**L**) a rézionnak két oxidációs állapota lehet (+I) vagy (+II), és mindegyiknek különböző a koordinációs szférája (tetra- vagy pentakoordinált).



A Cu(I) komplexek stabilitása kikövetkeztethető a komplex elektronszerkezetének a nemesgáz elektronszerkezettel történő összehasonlításából.

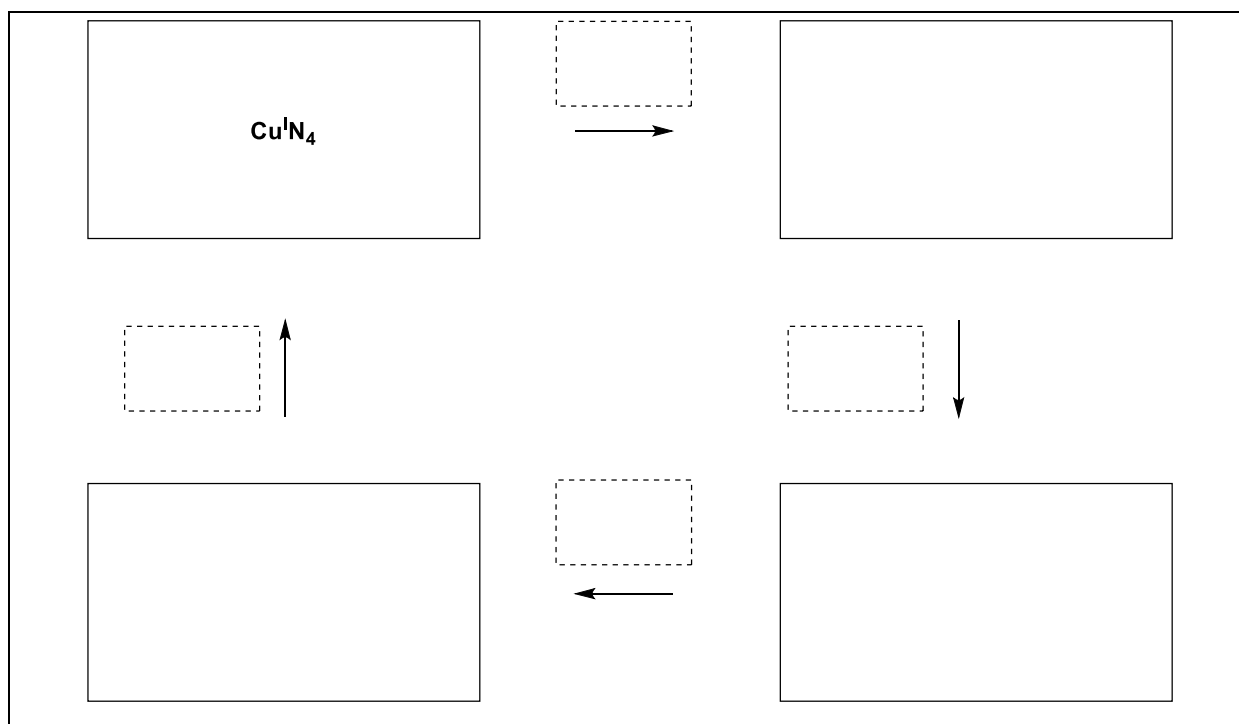
10. **Töltsd ki** az üres helyeket számokkal és X-elj!

A  $\text{Cu}^{\text{I}}\text{N}_4$  komplexben ... elektron található a fém koordinációs szférájában.

A  $\text{Cu}^{\text{I}}\text{N}_5$  komplexben ... elektron található a fém koordinációs szférájában.

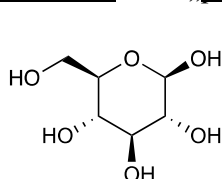
A  $\text{Cu}^{\text{I}}\text{N}_4$  komplex ☐ stabilabb / ☐ kevésbé stabil, mint a  $\text{Cu}^{\text{I}}\text{N}_5$  komplex.

11. **Töltsd ki** a nagy dobozokat a komplexek 2. ábrán látható jelöléseit használva, és írd bele az átalakulásokat is úgy, hogy az rendszer elektrokémiai úton kontrollálható legyen! A szaggatott vonalas dobozokba a következő jelöléseket írd:  (elfordulás);  $+e^-$ ;  $-e^-$ !

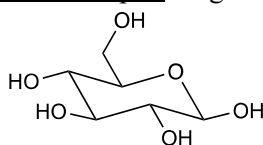


## T8 feladat: Inozitokok azonosítása és előállítása

Ebben a feladatban a  $\beta$ -glükóz példáján bemutatva definiáljuk a később általad is használandó „3D szerkezet” és a „perspektivikus képlet” fogalmát.



3D szerkezet



perspektivikus képlet

Az inozitokok ciklohexán-1,2,3,4,5,6-hexolok. Ezen hattagú karbociklusok közül több, kiemeltképpen a *myo*-inozitol, számos biológiai folyamat résztvevője.

### A *myo*-inozitol szerkezete

1. **Rajzold le** az inozitokok konstitúciós képletét, a sztereokémia jelölése nélkül!

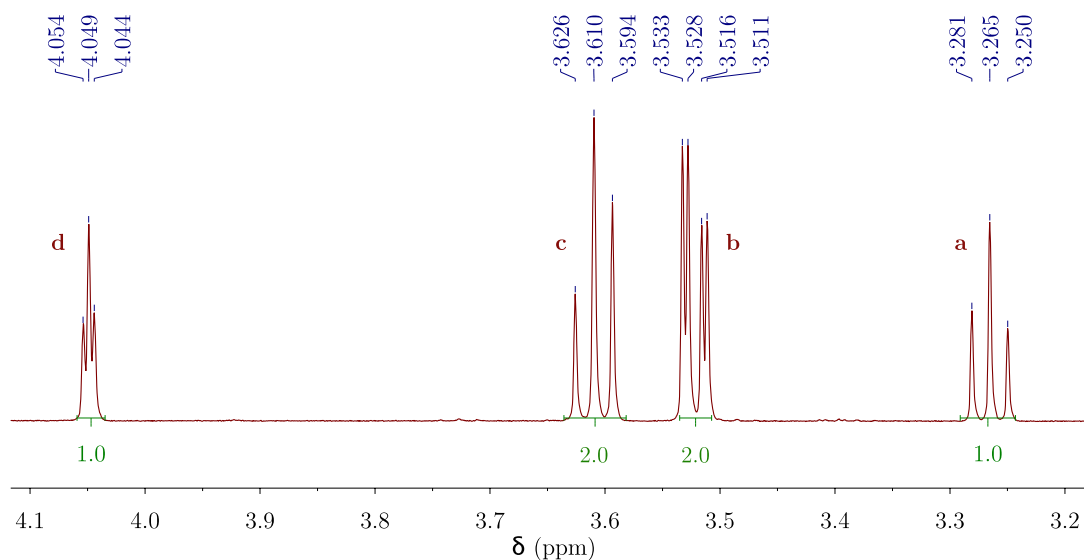


Ez a vegyületcsalád 9 különböző sztereoizomerből áll, az enantiomereket is beleértve.

2. **Rajzold le** az összes optikailag aktív sztereoizomer 3D szerkezetét!



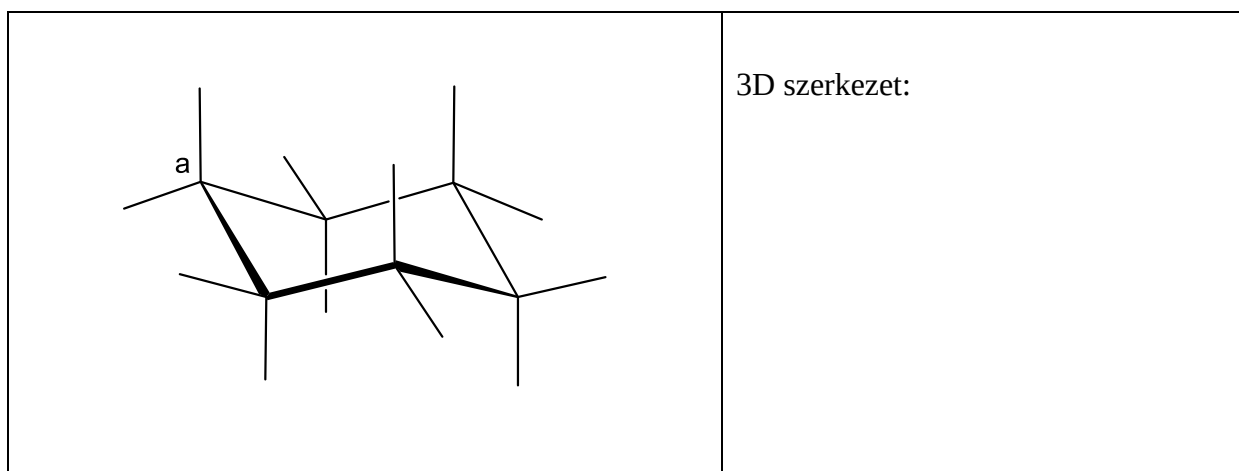
Az egyik specifikus inozitolt, a *myo*-inozitolt tanulmányozzuk a következőkben. Csak egyetlen egy kiemelten stabil székkonformere van, és a szerkezetét  $^1\text{H}$ -NMR spektrumából kikövetkeztethetjük. A következő oldalon látható a 600 MHz-es készüléken,  $\text{D}_2\text{O}$ -oldatban felvett spektruma. Az ott láthatóakon kívül más, a vegyülethez tartozó jel nincs a spektrumban. Az integrálértékek a megfelelő jelek alatt találhatók.



3. **Add meg** a molekulaképletét annak a *myo*-inozitol származéknak, amely a vizsgált minta főkomponense, és megfelel a  $^1\text{H}$ -NMR spektrumban megjelenő protonok számának!

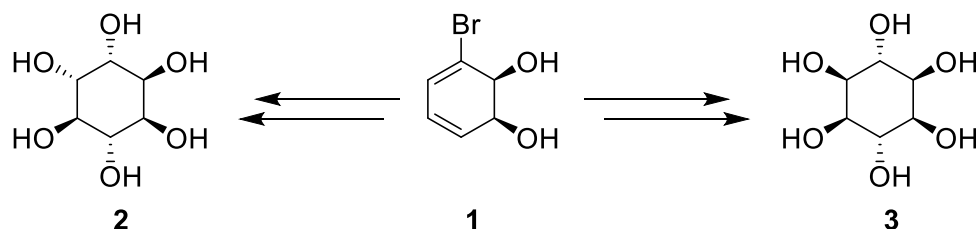
4. A proton jelek integráljainak alapján **add meg** a molekulában található tükörsík(ok) számát!

5. **Egészítsd ki** a legstabilabb *myo*-inozitol konformer perspektivikus képletét! Ezután minden hidrogénhez **rendeld hozzá** a megfelelő betűt (**a**, **b**, **c** vagy **d**) a fenti NMR spektrumból. Az **a** proton az alábbi ábrán az **a** betűvel megjelölt szénhez kell, hogy kapcsolódjon. **Rajzold le** a konformer 3D szerkezetét is!



## Inozitolok előállítása

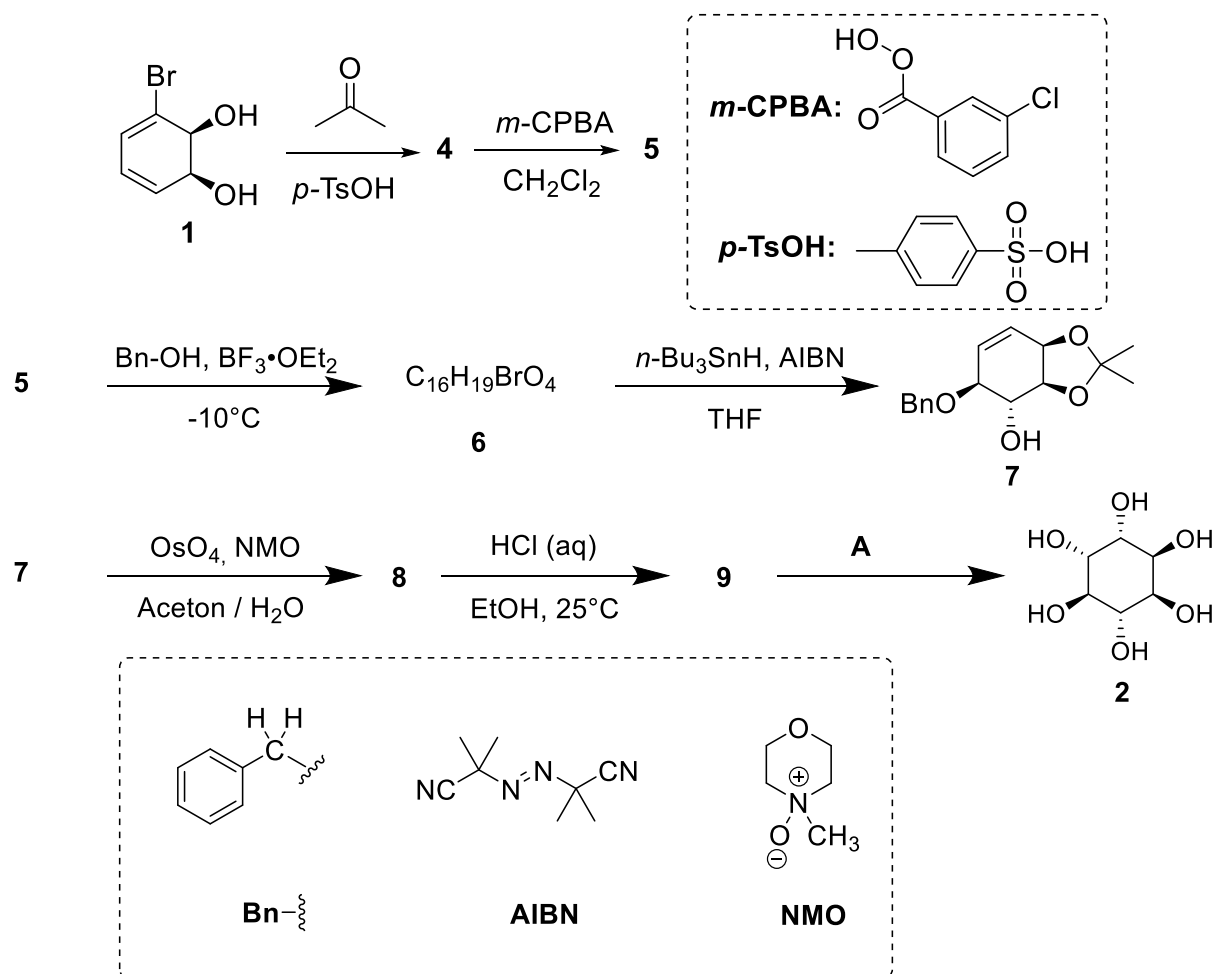
Gyógyászati célokra számos inozitol-foszfát ipari méretben is elérhető szintézisét oldották meg. A következőkben a **2** inozitol **1** brómdiolból kiinduló szintézisét fogjuk tanulmányozni.



6. **Válaszd ki** a helyes szerkezeti viszony(oka)t **2** és **3** között!

- ☐ enantiomerek  
☐ epimerek  
☐ diasztereomerek  
☐ atropizomerek

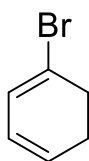
A **2** inozitolhoz az **1**-es vegyületből az alábbi 7 lépésben lehet eljutni.



7. **Rajzold le** a **4** vegyület 3D szerkezetét!

**4**

8. Az **5** vegyülethez vezető reakció a nagyobb elektronsűrűségű kettős kötésen játszódik le. Az alább látható 1-brómciklohexa-1,3-dién a **4** vegyület egy szerkezeti részlete. **Karikázd be** rajta a nagyobb elektronsűrűségű kettős kötést! Két külön rajzon **mutasd be** a bróm által okozott elektronikus hatásokat!



9. **Rajzold le** az **5** főtermékként keletkező diasztereomerének 3D szerkezetét!

**5**

10. **Hány** lehetséges sztereoizomere képződik az **5** vegyületnek, ha a szintézis enantiomertiszta **1**-ből indul ki?

11. Az **5** → **6** lépésben képződik egy másik termék (**6'**) azonos összegképlettel. **Rajzold le** **6** és **6'** 3D szerkezetét!

**6**

**6'**

12. **Rajzold le** a **8** és **9** főtermékként keletkező diasztereomereinek 3D szerkezetét!

|          |          |
|----------|----------|
| <b>8</b> | <b>9</b> |
|----------|----------|

13. **Válaszd ki** a 2-t eredményező lépésnek megfelelő **A** reakciókörülményeket!

- ☐ H<sub>2</sub>, Pd/C  
☐ K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, HF  
☐ HCOOH, H<sub>2</sub>O  
☐ BF<sub>3</sub>·OEt<sub>2</sub>

14. Ha az **1** vegyületben nem lenne bróm, a **2** egy másik sztereoizomeréhez jutnánk. Feltételezve, hogy a reakciósorban a regioszelektivitás nem változna és ugyanannyi ekvivalenset alkalmaznánk a reagensekből, mint a **2**-höz vezető szintézisben. **Rajzold le** a keletkező sztereoizomer 3D szerkezetét és **jelöld** **2**-vel való viszonyát!

- ☐ enantiomerek  
☐ epimerek  
☐ diasztereoizomerek  
☐ atropizomerek

15. A **2** **1**-ből induló szintézise során **mely** lépés(ek) során történik védő-, illetve irányítócsoportok eltávolítása?

- ☐ **1** → **4**  
☐ **4** → **5**  
☐ **5** → **6**  
☐ **6** → **7**  
☐ **7** → **8**  
☐ **8** → **9**  
☐ **9** → **2**

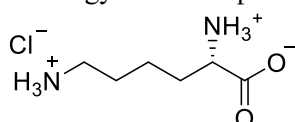


| T9 feladat<br>7% | Kérdés | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6  | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | Össz |
|------------------|--------|---|---|---|---|---|----|---|---|---|----|----|----|----|------|
|                  | Max    | 2 | 2 | 4 | 3 | 2 | 17 | 1 | 1 | 2 | 4  | 2  | 2  | 2  | 44   |
|                  | Pont   |   |   |   |   |   |    |   |   |   |    |    |    |    |      |

## T9 feladat: A levobupivakain előállítása

### I. rész

A helyi érzéstelenítő bupivacain (kereskedelmi neve: Marcaine) a WHO alapvető gyógyszerek listáján szereplő hatóanyag. Bár jelenleg ezt a hatóanyagot racém formában alkalmazzák, de bizonyított, hogy egyik enantiomere, a levobupivakain kevésbé szívkárosító, így biztonságosabb, mint a racém elegy. A levobupivakain előállítható a természetes aminosav L-lizinből.



L-lizin-hidroklorid

- Határozd meg** az L-lizin-hidroklorid kiralitáscentrumának abszolút konfigurációját, válaszodat **indokold** a szubsztituensek rangjának feltüntetésével!

|                                                          |                         |
|----------------------------------------------------------|-------------------------|
| Konfiguráció:                                            | Rangsor: 1 > 2 > 3 > 4: |
| <input type="checkbox"/> R<br><input type="checkbox"/> S |                         |

- Az L-lizinben az L a relatív konfigurációt jelöli. **Válaszd ki** a helyes állítást:

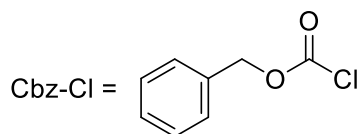
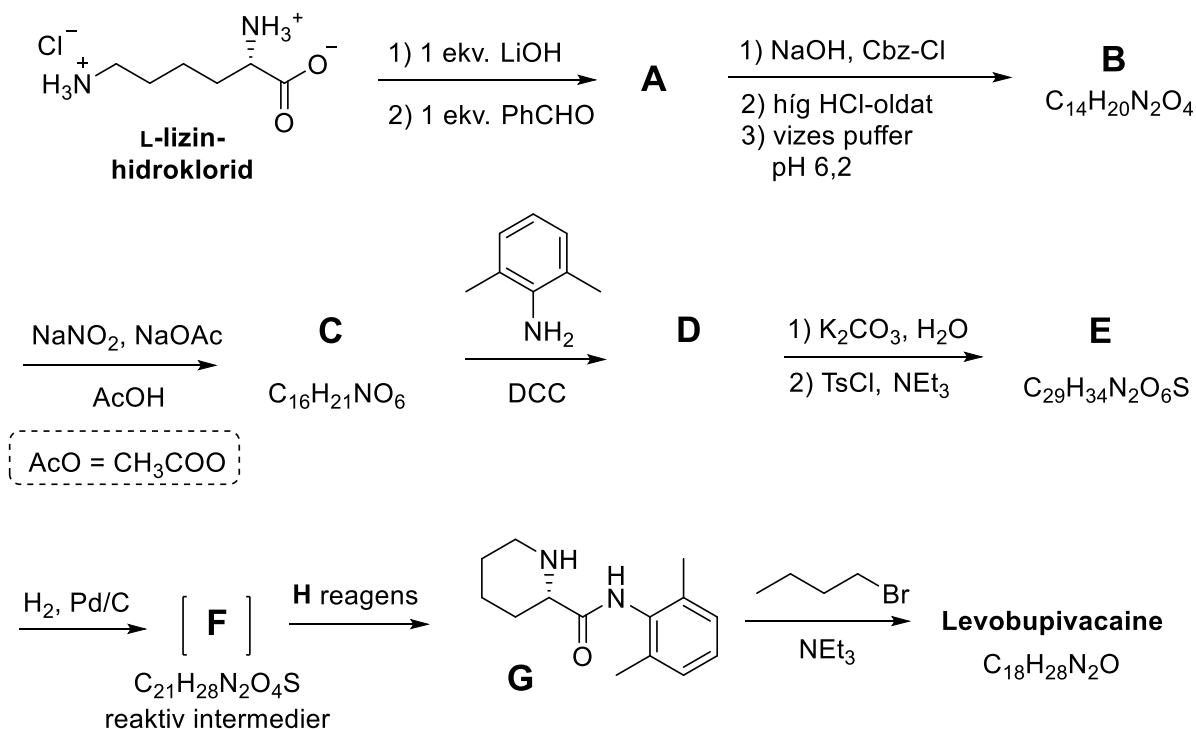
- ☐ Minden természetes L-aminosav balra forgató.  
☐ A természetes L-aminosavak balra-, illetve jobbra forgatók is lehetnek.  
☐ Minden természetes L-aminosav (S) konfigurációjú.  
☐ Minden természetes L-aminosav (R) konfigurációjú.

Gyakran, az L-lizinnek csak az egyik aminocsoportját szeretnénk átalakítani.  $\text{Cu}^{2+}$  só és feleslegben lévő nátrium-hidroxid-oldat segítségével az egyik aminocsoport szelektíven maszkírozható. A komplex képződése után csak a nem komplexált  $\text{NH}_2$  csoport marad reaktív.

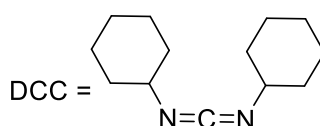
- Tekintettel arra, hogy az L-lizin kétfogú ligandum, és kettő koordinálódik belőle vizes hidroxid-oldatban egy  $\text{Cu}^{2+}$  ionhoz, **rajzold le** a komplex szerkezetét!

Komplex

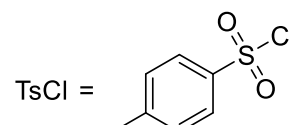
Szerencsére, az alább látható levobupivakain szintézisben ugyanaz az aminosó csoport lesz reaktív  $\text{Cu}^{2+}$  só jelenléte nélkül is.



(benziloxikarbonil-klorid)



(N,N'-diciklohexilkarbodiimid)



(p-toluolszulfonil-klorid)

Innentől kezdve használhatod a fenti ábrán lévő rövidítéseket.

4. **Rajzold le** az **A** vegyület szerkezetét, a megfelelő sztereokémiát is jelölve!

**A**

5. Az L-lizin átalakítása **A**-vá (**válaszd ki** a megfelelő válasz(oka)t):

- ☐ egy enantioszelektív reakció.  
☐ egy enantiospecifikus reakció.  
☐ egy regioszelektív reakció.

6. **Rajzold le** a **B–F** vegyületek szerkezetét, a megfelelő sztereokémiát is jelölve!

|                                |                                |
|--------------------------------|--------------------------------|
| <b>B</b> $C_{14}H_{20}N_2O_4$  | <b>C</b> $C_{16}H_{21}NO_6$    |
| <b>D</b>                       | <b>E</b> $C_{29}H_{34}N_2O_6S$ |
| <b>F</b> $C_{21}H_{28}N_2O_4S$ |                                |

7. A **C** → **D** átalakításban mi a DCC szerepe?

- ☐ Az aminocsoport védőcsoportja.
- ☐ A hidroxilcsoport védőcsoportja.
- ☐ Aktiváló reagens az amidkötés kialakításához.

8. A TsCl-ot azért használjuk az előállítás során, hogy végrehajtható legyen:

- ☐ egy aminocsoport nukleofil szubsztitúciója.
- ☐ egy aminocsoport elektrofil szubsztitúciója.
- ☐ egy hidroxilcsoport nukleofil szubsztitúciója.
- ☐ egy hidroxilcsoport elektrofil szubsztitúciója.

9. **Jelöld be** az összes olyan reagenst, amelyet **H** reagensként használhatunk:

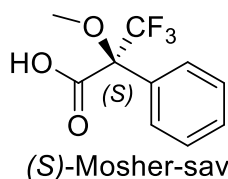
- |                                                         |                                                         |
|---------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| <input type="checkbox"/> híg HCl-oldat                  | <input type="checkbox"/> Zn/HCl                         |
| <input type="checkbox"/> K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> | <input type="checkbox"/> H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> |
| <input type="checkbox"/> híg KMnO <sub>4</sub> -oldat   | <input type="checkbox"/> híg NaOH-oldat                 |
| <input type="checkbox"/> SOCl <sub>2</sub>              | <input type="checkbox"/> PCl <sub>5</sub>               |

10. **Rajzold le** az levobupivakain szerkezetét, a megfelelő sztereokémiát is jelölve!

Levobupivakain C<sub>18</sub>H<sub>28</sub>N<sub>2</sub>O

## II. rész

A levobupivakain előállításához enantiomer tiszta L-lizin szükséges. Egy általános módszer az aminosavak enantiomertisztaságának meghatározására az, hogy amiddá alakítjuk őket Mosher-savval (az (S)-izomer szerkezete alább látható).



11. **Rajzold le** annak az aminnak a szerkezetét, ami az (S)-Mosher-sav és az L-lizin α-aminocsoportjának reakciójában keletkezik! Világosan jelöld a sztereokémiát mindegyik kiralitáscentrumnál!

12. **Hány termék** keletkezik, ha racém lizint reagáltatunk (S)-Mosher-savval (úgy, hogy csak a lizin α-aminocsoportja reagál)?

- |                                                                              |
|------------------------------------------------------------------------------|
| <input type="checkbox"/> Két diasztereomer.                                  |
| <input type="checkbox"/> Négy diasztereomer.                                 |
| <input type="checkbox"/> Két enantiomer racém elegye.                        |
| <input type="checkbox"/> Négy vegyület: két enantiomer és két diasztereomer. |

13. **Melyik** módszerrel/módszerekkel lehet számszerűleg meghatározni a lizin enantiomertisztaságát a Mosher-savas származékképzés után?

- |                                                     |
|-----------------------------------------------------|
| <input type="checkbox"/> NMR spektroszkópia.        |
| <input type="checkbox"/> Folyadékkromatográfia.     |
| <input type="checkbox"/> Tömegspektrometria.        |
| <input type="checkbox"/> UV-látható spektroszkópia. |