



Általános tudnivalók



- Csak tollal írd! A számológéped nem lehet programozható.
- A dolgozat a bevezető rész nélkül is csupán csak **63 oldalacskát** tartalmaz.
- A dolgozat röpké **9 feladatból** áll.
- **5 órád** van erre a kevéske munkára.
- Csak akkor állj neki a munkának, amikor a **START** elhangzik.
- Mindent a **válaszlapok** megfelelő területére írd, tollal! A kérdések hátoldalát használd firka papírnak! Amit nem a megfelelő négyzetbe írsz, nem fogják pontozni.
- A kapcsolódó érdemi számolásokat is feltétlen írd a válaszdobozba! Helyes eredményre is csak akkor jár pont, ha látszik, milyen úton kaptad.
- A felügyelő **30 perccel** a vége előtt figyelmeztetést fog adni.
- A **STOP** hallatára **meg kell állnod**, különben elbuksz mindent.
- A hivatalos angol verzióból is kérhetsz, ha a fordításunk értelmetlenre sikerült.
- Nem szabad elhagynod a munkahelyedet engedély nélkül. Ha kell valami (lerobbant a számológép, ki kell menni), szólj!

EGY KALAPPAL!



Feladatok és pontozás

Feladat	Cím	Részpontok összege	A végeredmény százalékában
1	Két török szépség: az úszó és az angóramacska	24	8
2	Mese egy reaktív intermedierről	77	10
3	(±)-Coerulescine	51	8
4	A szimmetria számít csak igazán!	66	10
5	Konya, répa, béta-karotin, A-vitamin, immunrend- szer, látás	100	14
6	Termodinamika egy csillagközi túrán	80	12
7	Ftalocianinok	85	12
8	Bórvegyületek és hidrogéntárolás	58	14
9	Nehézfémek mérése	100	12
	Összesen	641	100



Szerzők

ALANYALIOĞLU, Murat, *Atatürk University*

AYDOĞAN, Abdullah, *İstanbul Technical University*

BURAT, Ayfer Kalkan, *İstanbul Technical University*

DAĞ, Ömer, *Bilkent University*

DAŞTAN, Arif, *Atatürk University*

KILIÇ, Hamdullah, *Atatürk University*

METİN, Önder, *Koç University*

SARAÇOĞLU, Nurullah, *Atatürk University*

TÜRKMEN, Yunus Emre, *Bilkent University*

ÜNLÜ, Caner, *İstanbul Technical University*

YILMAZ, İsmail, *İstanbul Technical University*

YURTSEVER, Mine, *İstanbul Technical University*

Szerkesztő

SARAÇOĞLU, Nurullah, *Atatürk University*



Állandók és egyenletek

Avogadro-szám	$N_A = 6,0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Boltzmann-állandó	$k_B = 1,3807 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Gázállandó	$R = 8,3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 0,08205 \text{ atm dm}^3 \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
Fénysebesség	$c = 2,9979 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$
Planck-állandó	$h = 6,6261 \times 10^{-34} \text{ Js}$
Faraday-állandó	$F = 9,6485 \times 10^4 \text{ C mol}^{-1}$
Az elektron tömege	$m_e = 9,1093 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Standard nyomás	$p^\ominus = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$
légköri nyomás	$p_{atm} = 1,01325 \times 10^5 \text{ Pa}$ $p_{atm} = 760 \text{ mmHg} = 760 \text{ torr}$
A Celsius skála nullpontja	$273,15 \text{ K}$
1 pikométer (pm)	10^{-12} m ; $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$
1 nanométer (nm)	10^{-9} m
	$1 \text{ eV} = 1,6021 \times 10^{-19} \text{ J}$
	$1 \text{ cal} = 4,184 \text{ J}$
	$1 \text{ amu} = 1,6605 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Az elektron töltése	$1,6021 \times 10^{-19} \text{ C}$
Ideális gázegyenlet	$PV = nRT$



Állandók és egyenletek

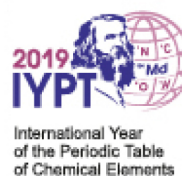
Entalpia	$H = U + PV$
Szabadentalpia	$G = H - TS$
	$\Delta_r G = \Delta G^0 + RT \ln Q$
	$\Delta_r G^0 = -RT \ln K = -nFE_{cell}^0$
Entrópiaváltozás	$\Delta S = \frac{q_{rev}}{T}$, ahol q_{rev} a reverzibilis folyamat hője
Entrópiaváltozás	$\Delta S = nR \ln \frac{v_2}{v_1}$ (ideális gáz izoterm kiterjedésekor)
Nernst-egyenlet	$E = E^0 + \frac{RT}{nF} \ln \frac{C_{ox}}{C_{red}}$
Egy foton energiája	$E = \frac{hc}{\lambda}$
Integrált sebességi egyenletek	
Nulladrendű	$[A] = [A]_0 - kt$
Elsőrendű	$\ln [A] = \ln [A]_0 - kt$
Másodrendű	$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt$
Arrhenius-egyenlet	$k = Ae^{-E_a/RT}$
Lineáris kalibrációs görbe	$y = mx + n$
Lambert-Beer-egyenlet	$A = \varepsilon lc$

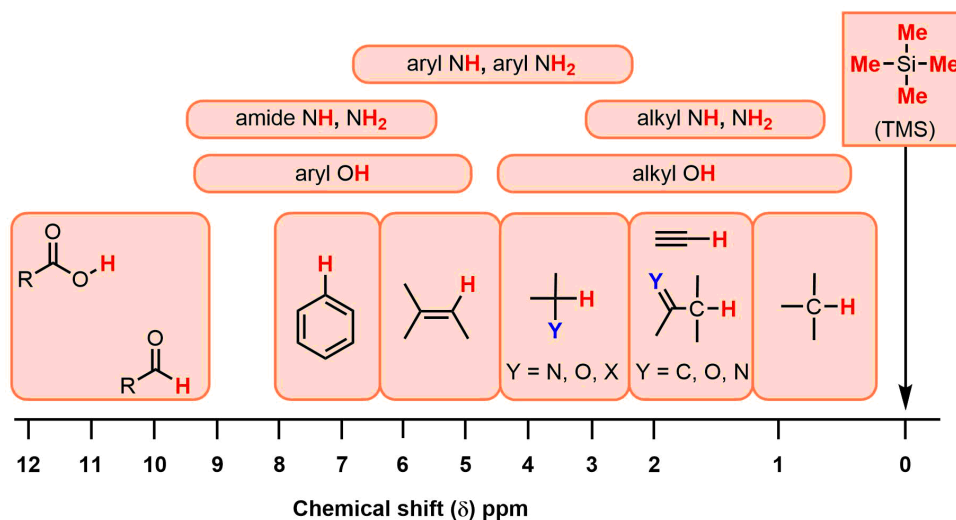


Periodusos rendszer

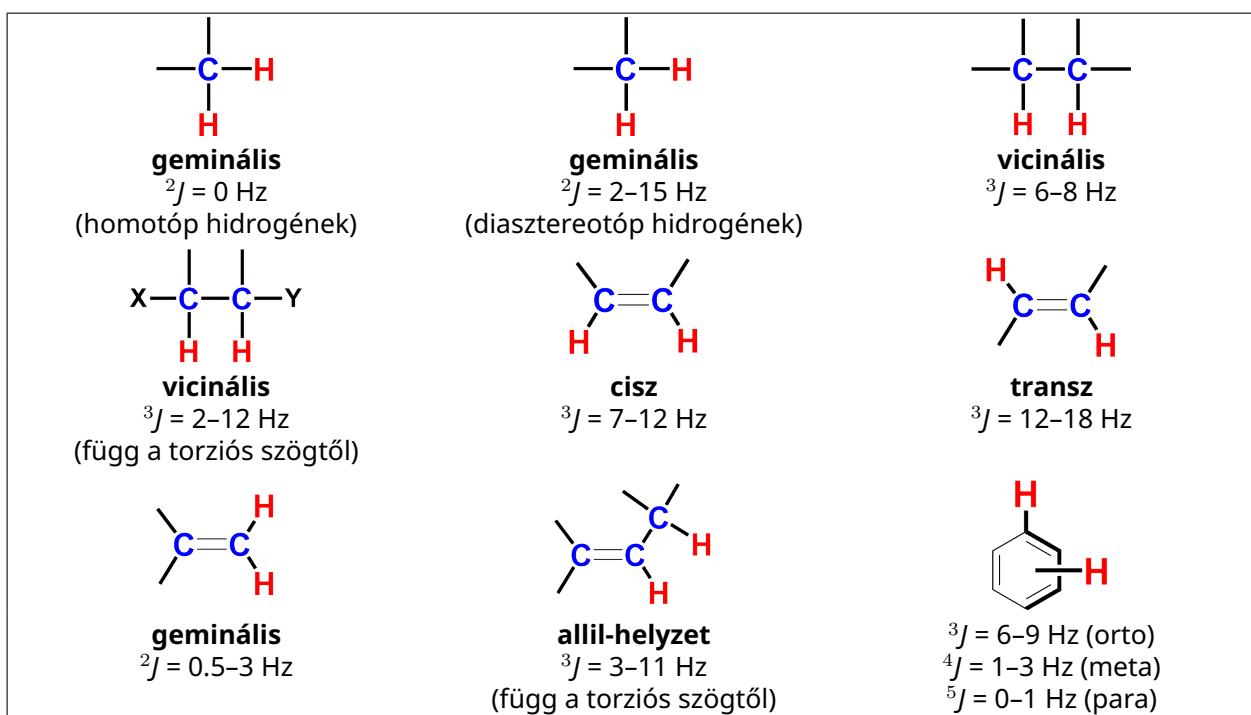
1																	18																		
1 H 1.008		2		atomic number Symbol atomic weight														13		14		15		16		17		2 He 4.003							
3 Li 6.94		4 Be 9.01																5 B 10.81		6 C 12.01		7 N 14.01		8 O 16.00		9 F 19.00		10 Ne 20.18							
11 Na 22.99		12 Mg 24.31		3		4		5		6		7		8		9		10		11		12		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 39.10		20 Ca 40.08		21 Sc 44.96		22 Ti 47.87		23 V 50.94		24 Cr 52.00		25 Mn 54.94		26 Fe 55.85		27 Co 58.93		28 Ni 58.69		29 Cu 63.55		30 Zn 65.38		31 Ga 69.72		32 Ge 72.63		33 As 74.92		34 Se 78.97		35 Br 79.90		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 95.95		43 Tc -		44 Ru 101.1		45 Rh 102.9		46 Pd 106.4		47 Ag 107.9		48 Cd 112.4		49 In 114.8		50 Sn 118.7		51 Sb 121.8		52 Te 127.6		53 I 126.9		54 Xe 131.3	
55 Cs 132.9		56 Ba 137.3		57-71		72 Hf 178.5		73 Ta 180.9		74 W 183.8		75 Re 186.2		76 Os 190.2		77 Ir 192.2		78 Pt 195.1		79 Au 197.0		80 Hg 200.6		81 Tl 204.4		82 Pb 207.2		83 Bi 209.0		84 Po -		85 At -		86 Rn -	
87 Fr -		88 Ra -		89-103		104 Rf -		105 Db -		106 Sg -		107 Bh -		108 Hs -		109 Mt -		110 Ds -		111 Rg -		112 Cn -		113 Nh -		114 Fl -		115 Mc -		116 Lv -		117 Ts -		118 Og -	

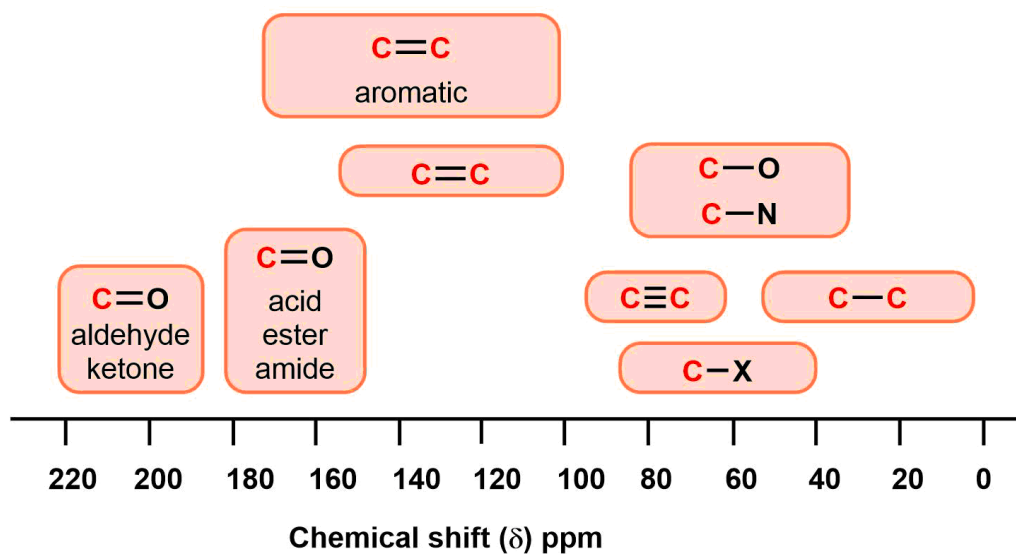
57 La 138.9	58 Ce 140.1	59 Pr 140.9	60 Nd 144.2	61 Pm -	62 Sm 150.4	63 Eu 152.0	64 Gd 157.3	65 Tb 158.9	66 Dy 162.5	67 Ho 164.9	68 Er 167.3	69 Tm 168.9	70 Yb 173.0	71 Lu 175.0
89 Ac -	90 Th 232.0	91 Pa 231.0	92 U 238.0	93 Np -	94 Pu -	95 Am -	96 Cm -	97 Bk -	98 Cf -	99 Es -	100 Fm -	101 Md -	102 No -	103 Lr -



¹H-NMR kémiai eltolódások

Jellemző csatolási állandók



¹³C-NMR kémiai eltolódások



IR elnyelések frekvenciái

Funkciós csoport	Rezgés típusa	Elnyelés régiója (cm ⁻¹)	Intenzitás
Alkohol			
O-H	(nyújtás, H-kötött)	3600–3200	erős, széles
	(nyújtás, szabad)	3700–3500	erős, éles
C-O	(nyújtás)	1150–1050	erős
Alkán			
C-H	nyújtás	3000–2850	erős
	hajlítás	1480–1350	változó
Alkén			
=C-H	nyújtás	3100–3010	közepes
	hajlítás	1000–675	erős
C=C	nyújtás	1680–1620	változó
Alkil-halid			
C-F	nyújtás	1400–1000	erős
C-Cl	nyújtás	800–600	erős
C-Br	nyújtás	600–500	erős
C-I	nyújtás	500	erős
Alkin			
C-H	nyújtás	3300	erős, éles
C≡C	nyújtás	2260–2100	változó, szimmetrikus alkinekben hiányzik



IR elnyelések frekvenciái

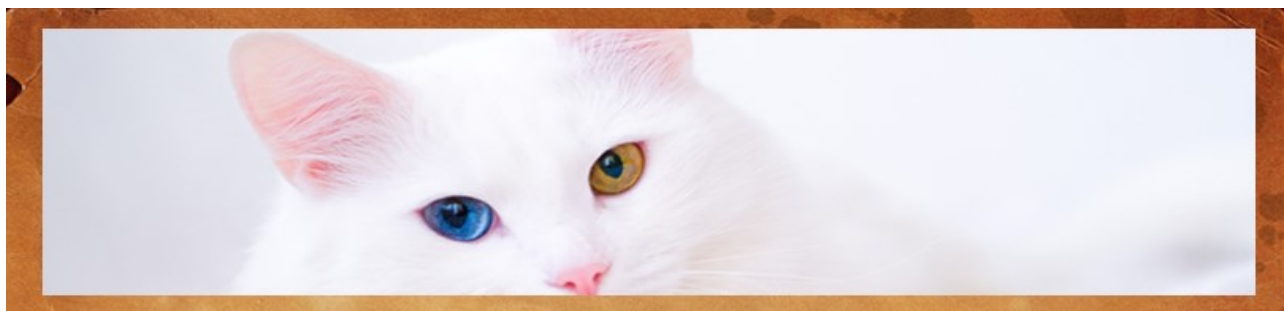
Amin			
N-H	nyújtás	3500-3300	közepes (primer aminokban két sáv; szekunder aminokban egy sáv, gyakran nagyon gyenge)
C-N	nyújtás	1360-1080	közepes-gyenge
N-H	hajlítás	1600	közepes
Aromás			
C-H	nyújtás	3100-3000	közepes
C=C	nyújtás	1600-1400	közepes-gyenge, több sáv
Karbonil			
C=O	nyújtás	1820-1670	erős
Karbonsav			
C=O	nyújtás	1725-1700	erős
O-H	nyújtás	3300-2500	erős, nagyon széles
C-O	nyújtás	1320-1210	erős
Aldehid			
C=O	nyújtás	1740-1720	erős
C-H	nyújtás	2850-2820 & 2750-2720	közepes, két csúcs
Amid			
C=O	nyújtás	1690-1640	erős
N-H	nyújtás	3500-3100	szubsztituálatlannak két sáv
	hajlítás	1640-1550	



Anhidrid			
C=O	nyújtás	1830–1800 & 1775–1740	két sáv
Ester			
C=O	nyújtás	1750–1735	erős
C–O	nyújtás	1300–1000	két vagy több sáv
Keton			
nyílt láncú	nyújtás	1725–1705	erős
gyűrűs	nyújtás	3 tagú - 1850	erős
	nyújtás	4 tagú - 1780	erős
	nyújtás	5 tagú - 1745	erős
	nyújtás	6 tagú - 1715	erős
	nyújtás	7 tagú - 1705	nyújtás
α, β -telítetlen	nyújtás	1685–1665	erős
konjugáció hatására kisebb hullámszámok			
aril keton	nyújtás	1700–1680	erős
Éter			
C–O	nyújtás	1300–1000 (1150–1070)	erős
Nitril			
$\text{C}\equiv\text{N}$	nyújtás	2260–2210	közepes
Nitro			
N–O	nyújtás	1560–1515 & 1385–1345	erős, két sáv

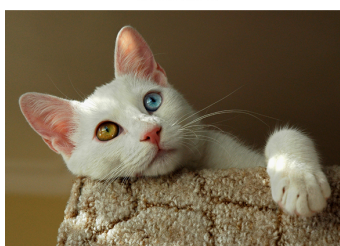


Két török szépség: az úszó és az angóra macska



A legszebb macskák a Van-tó medencéjében élő úszó macskák. De az Ankarában honos macskák sem kutyák. Őket szokták angóracicának is hívni. Mindkettő legfőbb ismertetőjegye a különböző színű szem.

Van cat



Ankara cat

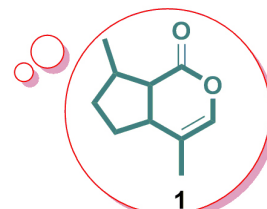
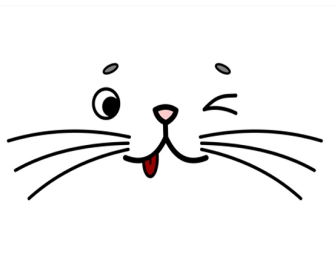
*Nepeta cataria* (catnip)

Az emberekhez hasonlóan a cicáknak is lehet rossz napja. Az emberek boldogságát a melatonin hatásosan fokozza, míg a macskák stresszoldásához és boldogságához egy másik természetes vegyület járul hozzá. A nepetalactone a macskamentából (*Nepeta cataria*) izolálható és attraktánsként működik macskák esetében. A nepetalactone egy tíz szénatomos biciklusos monoterpenoid vegyület, azaz izoprén származék és két kondenzált gyűrűből áll: egy ciklopentánból és egy laktonból.

Cat eating catnip in the garden



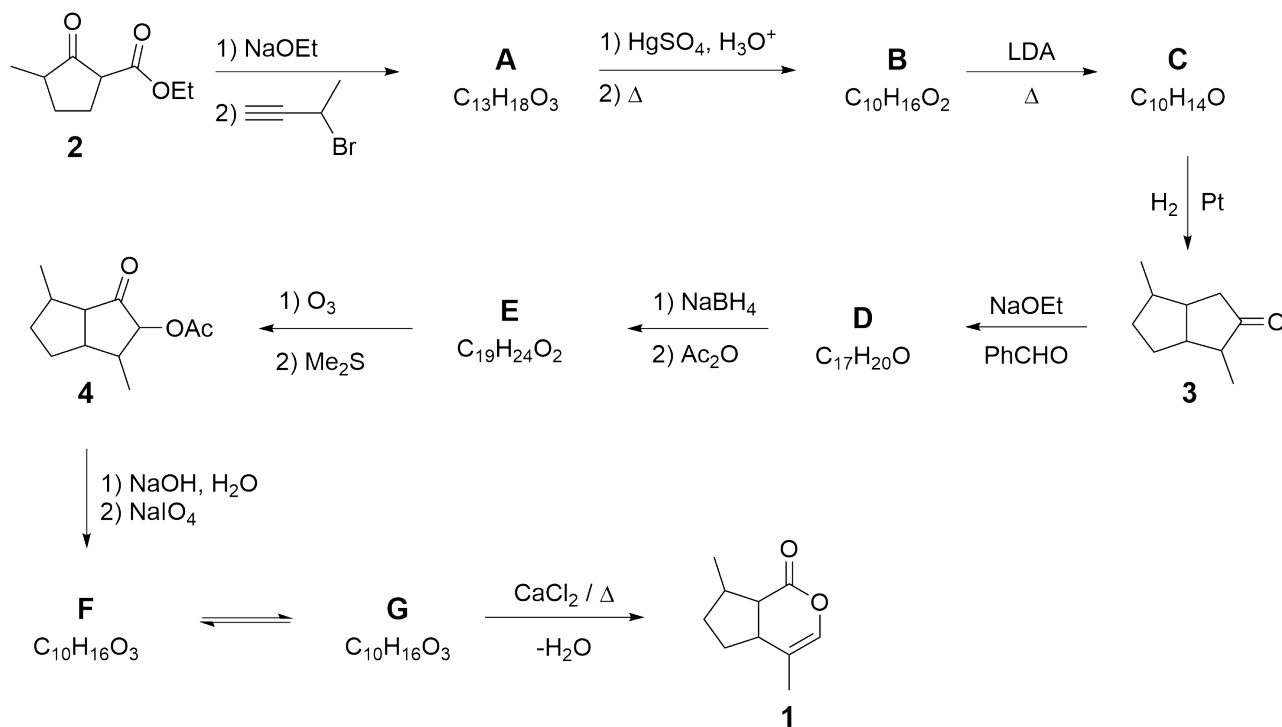
Cat's dream



Nepetalactone



A nepetalactone totálszintézise:



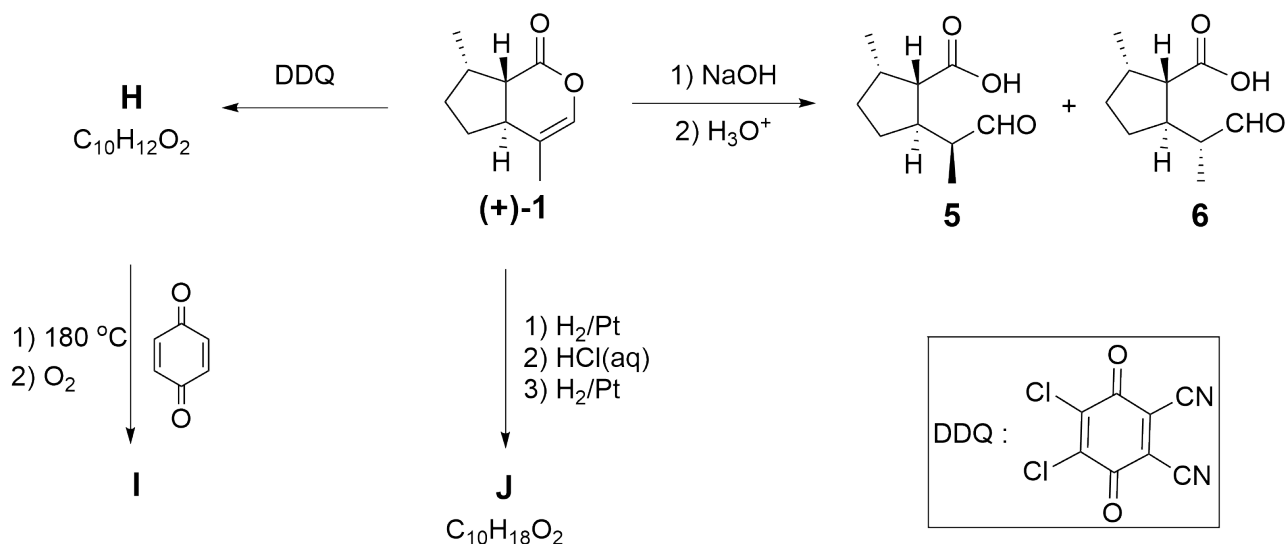
1.1 A fentebbi ábra a nepetalactone totálszintézisét mutatja be. Rajzold fel az **A–G** vegyületek szerkezetét, a sztereokémiát nem kell jelölnöd! 14.0pt

Segítségek:

- Az **A** vegyület IR spektrumában van egy erős és éles elnyelés 3300 cm^{-1} -nél.
- A**, **B** és **F** monociklusos, míg **C**, **D**, **E** és **G** vegyületek biciklusosak.
- Az **F** vegyület 1H -NMR spektrumában található egy dublett $\sim 9,8\text{ ppm}$ -nél.



A nepetalactone reakciói:



A fentebbi reakciósor az nepetalactone egyik enantiotiszta izomerjének (**1**) néhány továbbalakítását mutatja. Három reakcióterméket is (**5**, **6** és **J**) rovarriasztó-szerként használnak.

- 1.2** Az **5** és **6** vegyületek viszonyára melyik alábbi állítás(ok) igaz(ak)? Tegyéél X-t a helyes válasz(ok) dobozába a válaszlapon! 4.0pt

Az **1** vegyületet DDQ-val reagáltatva a kiterjedt konjugációval bíró **H** anyag képződik. Továbbá, a **H** egy termikus reakcióban *p*-kinonnal a 226,28 g/mol moláris tömegű **I** vegyületet adja.

- 1.3** Rajzold fel az **H**, **I** és **J** vegyületek szerkezetét a sztereokémia jelölésével! 6.0pt

Segítség:

- Az **I** képződése során egymást követő periciklusos reakciók és egy oxidációs reakció (az O_2 jelenléte következtében) játszódnak le, és egy jól ismert gáz is felszabadul.
- J** IR spektrumában található egy nagyon intenzív és széles sáv 3300 and 2500 cm^{-1} között.



A1-1

Hungarian (Hungary)

Két török szépség: az úszó és az angóramacska

1.1 (14.0 pt)

A	B
C	D
E	F
G	



A1-2

Hungarian (Hungary)

1.2 (4.0 pt)

- ☐ Enantiomerek
- ☐ Diasztereomerek
- ☐ Azonosak
- ☐ Sztereoizomerek

1.3 (6.0 pt)

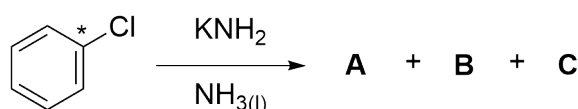
H	I
J	



Mese egy reaktív intermedierről

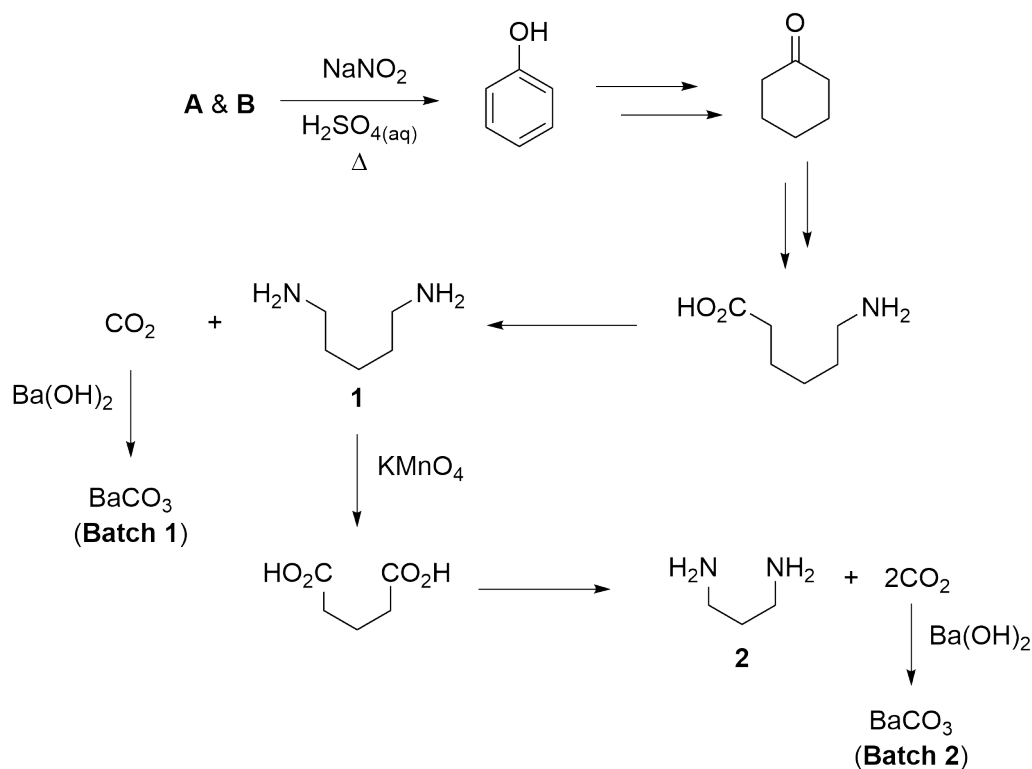
Az arinek egy speciális osztályát képezik a reaktív intermediereknek. Egy arin (a benzín) szerkezetét kísérletileg John D. Roberts és munkatársai igazolták egy elegáns izotópjelölési kísérlettel 1953-ban.

Az egyik ilyen kísérlet során klórbenzolt, amelynek az 1. pozíciójában lévő szén radioaktív ^{14}C -el jelölték, reagáltattak KNH_2 -al cseppfolyós NH_3 -ban, és a közel egyenlő mennyiségben keletkező **A** és **B** izotopikus izomerek mellett a **C** szervesetlen sót kapták. Ez a reakció a **D** arin intermedieren keresztül játszódik le.



2.1 Rajzold fel az A, B és D vegyületek szerkezetét, és add meg az C vegyület képletét! Tegyé a ^{14}C -jelölt szén(ek) mellé csillagot (*)! 7.0pt

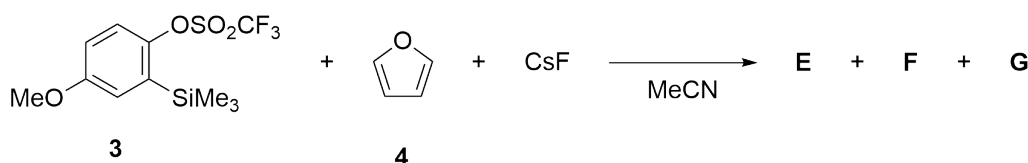
A ^{14}C -jelölt termék(ek)et lebontásos kísérletekkel vizsgálták (a ^{14}C -jelölt szén(ek) nincsenek jelölve). Az intermedierek és a végtermékek radioaktivitását vizsgálták.





2.2 Jelöld X-el a válaszlapon a megfelelő dobozokban, hogy melyik intermedierek, 9.0pt
illetve termékek lesznek várhatóan radioaktívak!

Az arin képzés megkönnyítéséhez Kobayashi és munkatársai egy fluoridion hatására lejátszódó arin képzést fejlesztettek ki. Ezt a módszert használva a **3** benzolszármazékot reagáltatták furánnal (**4**) CsF jelenlétében, és az **E**, **F** és **G** vegyületekhez jutottak.



- Az **E** elemanalízise során a következő atomi összetételt kapták: 75,8% szén, 5,8% hidrogén és 18,4% oxigén.
- Az **E** vegyület ^1H -NMR spektrumában nincs D_2O -val cserélhető proton.
- F** ionos vegyület.

2.3 Vázd az **E**, **F** és **G** vegyületek szerkezetét, a sztereokémiát nem kell jelölnöd! 8.0pt

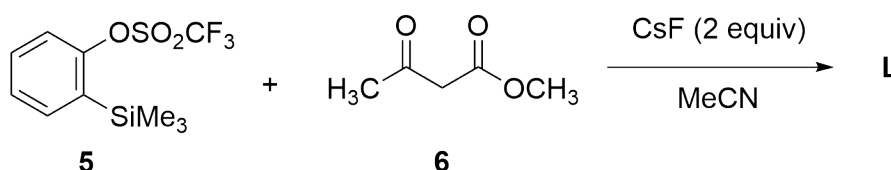
Nukleofil vagy csapdázó reagens távollétében az arinek [2+2]-típusú ciklodimerizációban vagy [2+2+2]-típusú ciklotrimerizációban vehetnek részt megfelelő körülmények között. A **3** vegyületet MeCN-ban egy ekvivalens CsF-al reagáltatva kapunk egy arin származékot, amelyik elvileg négy különböző dimerizált vagy trimerizált terméket adhat (**H-K**)

- H** két szimmetriasíkkal rendelkezik.
- I** ^{13}C -NMR spektrumában 21 jel található.
- I** és **J** tömegspektrumában megtalálható a 318,1 m/z jel.

2.4 Vázd a **H-K** vegyületek szerkezetét! 16pt

Az **5** vegyületet a **6** β -ketoészterrel reagáltatva 2 ekvivalens CsF jelenlétében 80 °C-on az **L** vegyület képződik főtermékként. Az **L** vegyületről ^1H -NMR és ^{13}C -NMR spektrumokat felvéve CDCl_3 -ban az alábbi eredményt kaptuk:

- ^1H -NMR: δ 7,79 (dd; $J = 7,6; 1,5$ Hz; 1H); 7,47–7,33 (m; 2H); 7,25–7,20 (m; 1H); 3,91 (s; 2H); 3,66 (s; 3H); 2,56 (s; 3H) ppm.
- ^{13}C -NMR: δ 201,3; 172,0; 137,1; 134,4; 132,8; 132,1; 130,1; 127,5; 51,9; 40,2; 28,8 ppm.





2.5 Vázzold az **L** vegyület szerkezetét!

5.0pt

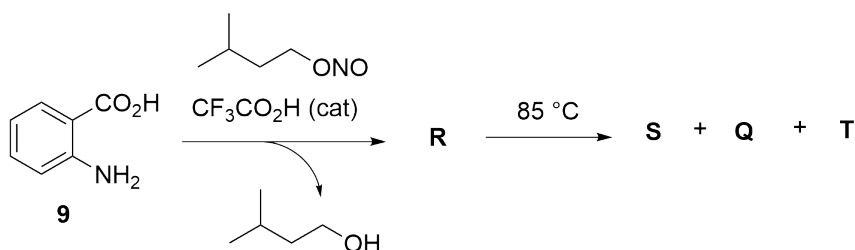
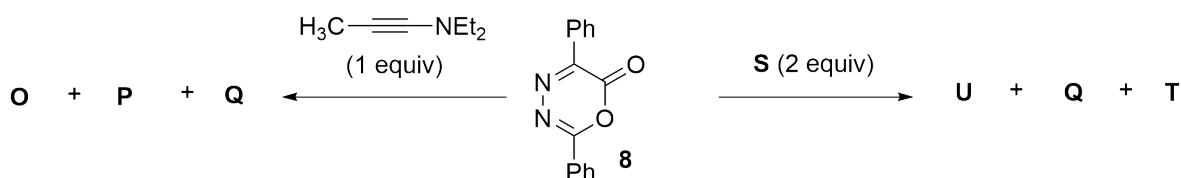
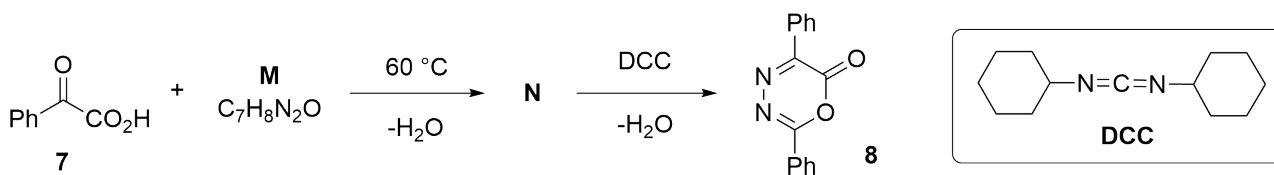
2.6 A **2.5** feladatban található reakcióban a CsF szerepét melyik a válaszlapon található állítás(ok) írja/írják le?

4.0pt

- Dimetil-szulfoxidban (DMSO) a HF és a **6** β -ketoészter pK_s értéke kb. 15, illetve 14.

A **8** diazapironszármazék egy hasznos reagens különböző gyűrűs alapvázak kialakításához. Az alábbiakban a fenil-glioxálsavból (**7**) történő előállítása és két különböző továbbalakítása látható.

- **Q** és **T** gázok az adott körülmények között.
- **O** és **P** konstitúciós izomerek.
- **Q** IR spektrumában semmilyen jel nem található.
- 1 mol **R**-t 85 °C-ra hevítve 1 mol **S** reaktív intermedier képződik.
- **8**-at kettő ekvivalens **S**-el reagáltatva **U**, **Q** és **T** képződik.



Jelmagyarázat:

equiv= ekvivalens

cat= katalizátor

2.7 Vázzold az **M-U** vegyületek szerkezetét!

28.0pt

**Mese egy reaktív intermedierről****2.1** (7.0 pt)

A	B
C	D

2.2 (9.0 pt)Csak **A** esetében:

- ☐ **1** vegyület
- ☐ BaCO₃ (Batch 1)
- ☐ **2** vegyület
- ☐ BaCO₃ (Batch 2)

Csak **B** esetében:

- ☐ **1** vegyület
- ☐ BaCO₃ (Batch 1)
- ☐ **2** vegyület
- ☐ BaCO₃ (Batch 2)



2.3 (8.0 pt)

E	F
G	

2.4 (16.0 pt)

H	I
J	K



A2-3

Hungarian (Hungary)

2.5 (5.0 pt)**L****2.6** (4.0 pt)

- ☐ A F^- az **5** vegyület trifluorometánszulfonát csoportját (O_3SCF_3) hidrolizálja.
- ☐ A F^- az **5** vegyület $-SiMe_3$ csoportját támadja.
- ☐ A F^- , mint bázis deprotonálja a **6** vegyületet.
- ☐ A F^- , mint nukleofil támadja a **6** észter csoportját.



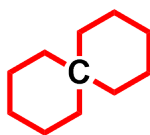
2.7 (28.0 pt)

M	N
O és P	Q
R	S
T	U

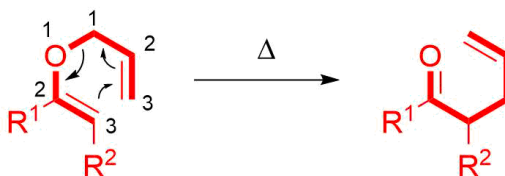


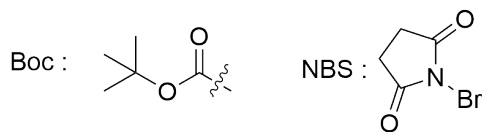
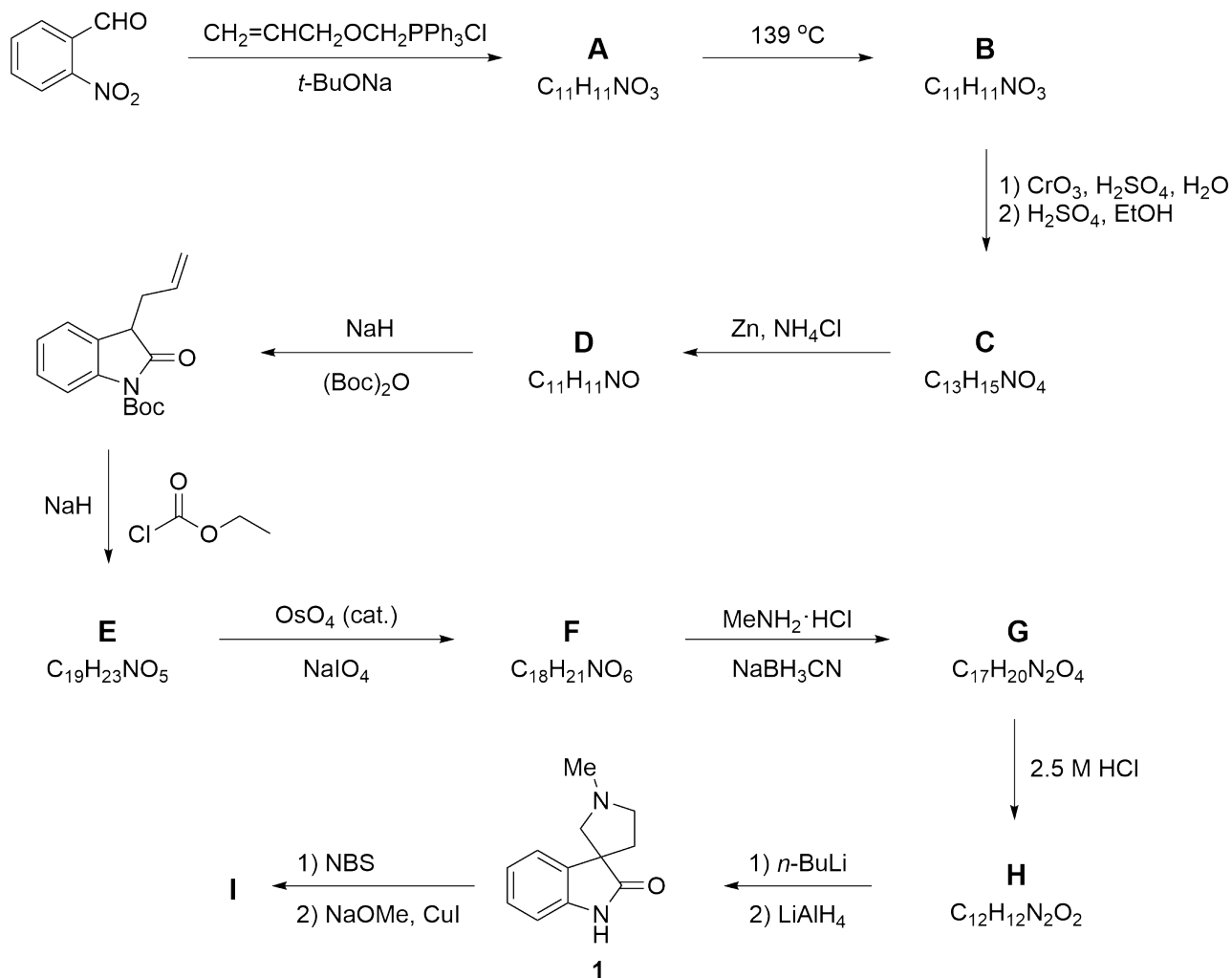
(±)-Coerulescine

A spirovegyületek jellemzően olyan többgyűrűs szerves vegyületek, amelyek gyűrűiben egy közös atom (spiroatom) van, ez a vastagított szénatom az alábbi ábrán. A spiro[pirrolidin-3,3'-oxindol] gyűrűrendszer számos citosztatikus természetes és mesterséges vegyület tartalmazza. A coerulescine (**1**) és a horsfiline a legegyszerűbb tipikus képviselői ennek a széles spektrumú biológiai aktivitást mutató családnak, melyeket az alább látható módon állítanak elő.



A Claisen-átrendeződés egy [3,3]-szigmatróp átrendeződés, ami egy hatékony módszer szén-szén kötés kialakítására. Ennek során egy allil-vinil-étert termikusan alakítanak át telítetlen karbonilvegyületté, mint ahogy az alábbi reakcióegyenlet is mutatja. Az **A** vegyület hevítésével egy Claisen-átrendeződés során a **B** karbonil-vegyület keletkezik. Ebben a feladatban nem kell jelölnöd a vegyületek sztereokémiáját.







- 3.1** Rajzold fel az **A** és **B** szerkezetét! 8.0pt
- **A** *cisz/transz* izomerek elválaszthatatlan elegye.
 - **B**-nek 1726 cm^{-1} -nél van IR elnyelése.

- 3.2** Rajzold fel a **C**, **D**, **E** és **F** szerkezetét! 16.0pt
- **D–F** biciklusos vegyületek.

- 3.3** Válaszd ki az **F–G** átalakítás során a lépések helyes sorrendjét! 4.0pt

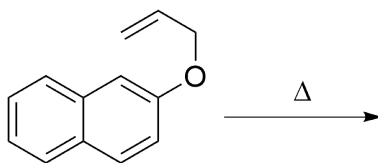
- 3.4** Rajzold fel a **G** és **H** vegyületek szerkezetét (mindkettő spirovegyület)! 8.0pt

- 3.5** Rajzold fel annak az intermedierek a szerkezetét, amelyek a **H** → **coerulescine** (1) átalakítás során képződik *n*-BuLi hatására! 5.0pt

Coerulescine-ből *N*-brómszukcinimiddal (NBS) egy brómszármazék képződik, amely réz(I)jodid jelenlétében nátrium-metoxiddal hevítve a **horsfiline-t** (**I**) adja 60%-os hozammal.

- 3.6** Válaszd ki az **I** helyes szerkezetét, amelyik megfelel a következő ^1H -NMR spektrum részlettel: δ 7,05 (d; $J = 1,4\text{ Hz}$; 1H); 6,78 (d; $J = 8,0\text{ Hz}$; 1H); 6,72 (dd; $J = 8,0$; 1,4 Hz; 1H) ppm. 5.0pt

- 3.7** A 2-naftol allil éterét hevítve egy szigmatróp átrendeződés indul el. Rajzold fel a reakcióelegyből végül izolálható főtermék szerkezetét! 5.0pt





(±)-Coerulescine

3.1 (8.0 pt)

A

B

3.2 (16.0 pt)

C

D

E

F



3.3 (4.0 pt)

- ☐ Iminképzés, majd redukció, majd amidképzés
- ☐ Amidképzés, majd iminképzés, majd redukció
- ☐ Redukció, majd amidképzés, majd iminképzés

3.4 (8.0 pt)

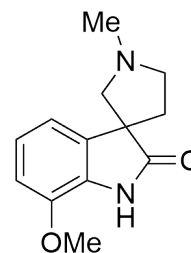
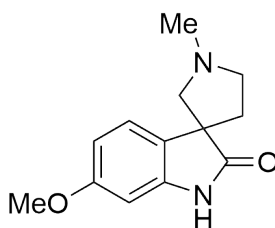
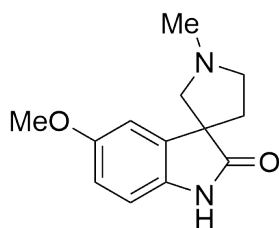
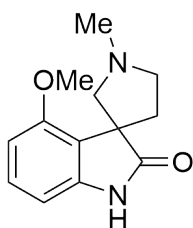
G

H

3.5 (5.0 pt)



3.6 (5.0 pt)

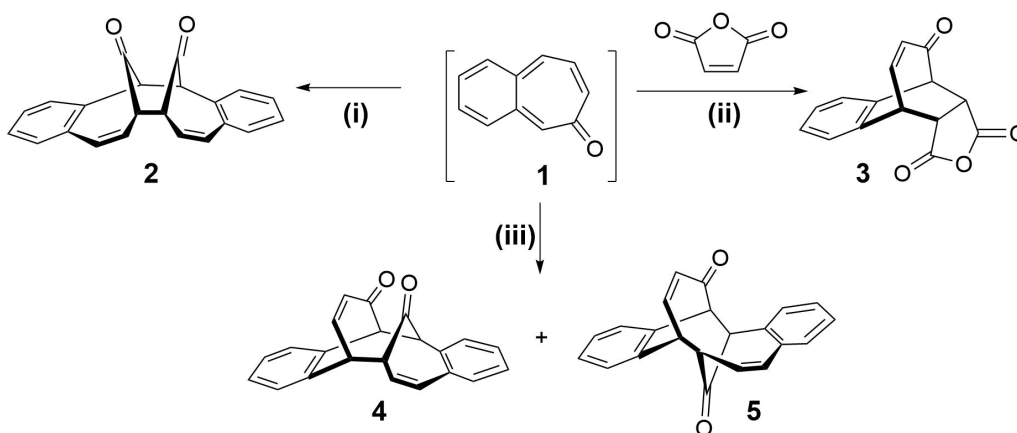


3.7 (5.0 pt)



A szimmetria számít csak igazán!

Számos szerves kémiai átalakulás játszódik le gyűrűs átmeneti állapoton keresztül; ezeket a periciklusos reakciók közé soroljuk. A Woodward-Hoffmann-szabályokat, amelyeket Robert B. Woodward és Roald Hoffmann alkotott meg, használjuk a periciklusos reakciók sztereokémiai jellemzőinek és aktiválásienergia-igényének értelmezésére.



Woodward-Hoffmann-szabályok				
Elektronok száma	Elektrociklusos reakciók		Cikloaddíciók	
	Termikus (Δ)	Fotokémiai ($h\nu$)	Termikus (Δ)	Fotokémiai ($h\nu$)
$4n$ ($n = 1, 2, \dots$)	Konrotáció (con)	Diszrotáció	Nem kedvezményezett	Kedvezményezett
$4n+2$ ($n = 1, 2, \dots$)	Diszrotáció (dis)	Konrotáció	Kedvezményezett	Nem kedvezményezett

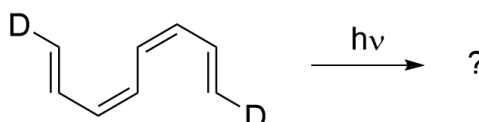
4.1 Töltsd ki a táblázatot az (i)–(iii) reakciókra, illetve a **2–5** vegyületekre 12.0pt vonatkozólag:

Három benzotropon izomer létezik, amelyből kettő izolálható, míg a 3,4-benzotropont (**1**) nem izolálták. Az **1** instabilitása az *o*-kinoidális szerkezetével magyarázható, hisz a benzol gyűrűben nincs meg az elektron szextett.

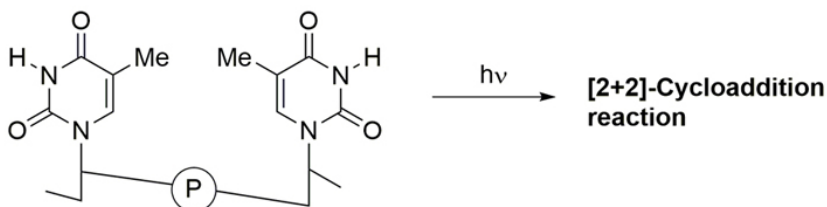
4.2 Rajzold fel a stabil benzotropon izomerek szerkezetét. Közülük az **A** ^{13}C -NMR 6.0pt spektruma 6 jelet tartalmaz, míg a **B** ^{13}C -NMR spektruma 11 jelet tartalmaz.



- 4.3** Amikor a következő tetraén fotokémiai körülmények között alakul át, akkor a Woodward-Hoffmann-szabályok alapján három különböző gyűrűméretben keletkezhetnének a szimmetria által megengedett termékek. **Jelöld be** minden sorban a helyes választ! 6.0pt

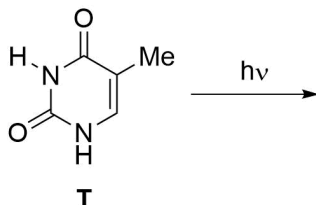


Prof. Dr. Aziz Sancar



2015-ben a kémiai Nobel-díjat megosztva a török Aziz Sancar, a svéd Tomas Lindahl és az amerikai Paul Modrich kapta "a DNS javító mechanizmusainak kutatásáért". A DNS-ben található pirimidinbázisok a bőrt érő UV fény hatására **[2+2] cikloaddícióban** vehetnek részt (ld. a fenti ábrát). Ez által roncsolódik a DNS, és ez bőrrákot is előidézhethet. Aziz Sancar professzor kutatásai során az ilyen típusú DNS-hibák javításának mechanizmusát vizsgálta.

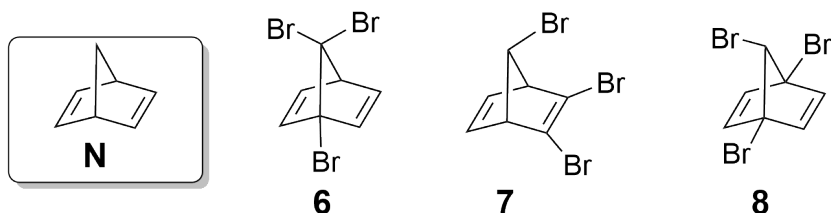
A timin (**T**) az egyik nukleotidbázis, amely résztvehet ebben a fotokémiai reakcióban UV fény hatására. Szabad timint tartalmazó oldatot sugárzunk be UV fénnel.



- 4.4** **Rajzold fel** a szerkezetét a két szabad timinmolekula (**T**) reakciójában keletkező **összes** sztereokémiaiilag **lehetséges terméknek**! **Karikázd be** a királis vegyület(ek)et! Az enantiomer párokból elegendő csak az egyiket felrajzolni. Figyelj arra, hogy csak a C=C kötések vesznek részt a reakcióban! 16.0pt



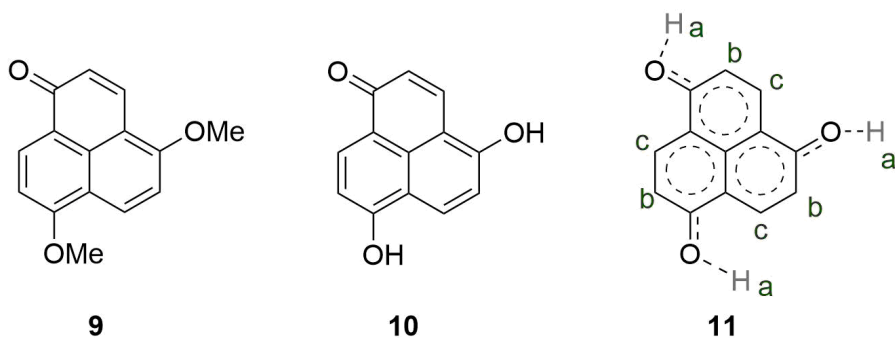
A szakirodalomban széleskörben ismertek a norbornadién (**N**) halogénezett származékai. A tribróm-norbornadiénnek ($C_7H_5Br_3$) hat akirális (mezo) izomere van. Három (**6**, **7** és **8**) ezek közül alább látható.



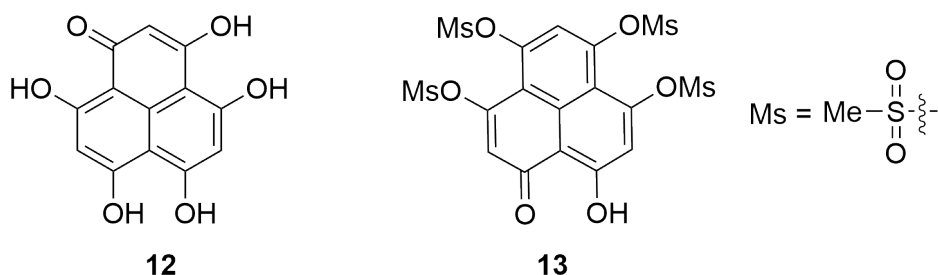
4.5 Mennyi jelet vársz a **6**, **7** és **8** vegyületek ^{13}C -NMR spektrumaiban? Írd be a 9.0pt
dobozokba!

4.6 Rajzold fel a további (a **6–8** izomereken felüli) akirális (mezo) tribróm- 9.0pt
norbornadién ($C_7H_5Br_3$) izomereket (**C**, **D** és **E**) a dobozokba rajzolt vázakra!

A **9** éter NMR spektruma meglehetősen bonyolult. A két MeO- csoport különböző, éppúgy, mint a gyűrűkön található összes hidrogén is. Ellenben a **10** fenol NMR spektruma nagyon egyszerű; összesen háromfajta proton található benne (a, b és c-vel jelöltük őket). Egy átlagolt szerkezet és annak szimmetriája látható az alábbi ábrán (**11**).



4.7 A **12** és **13** vegyület esetében hány darab jelet vársz a ^{13}C -, illetve 1H -NMR spek- 8.0pt
trumaikban?



**A4-1**

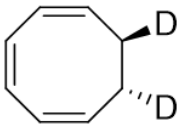
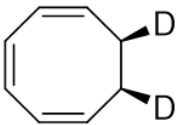
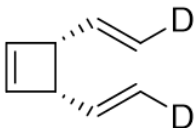
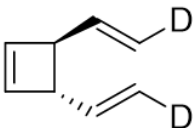
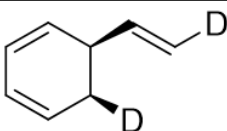
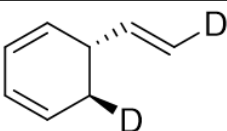
Hungarian (Hungary)

A szimmetria számít csak igazán!**4.1** (12.0 pt)

Reakció	Termék	[? + ?] cikloaddíció	Δ vagy $h\nu$
i	2		
ii	3		
iii	4		
	5		

4.2 (6.0 pt)**A****B**

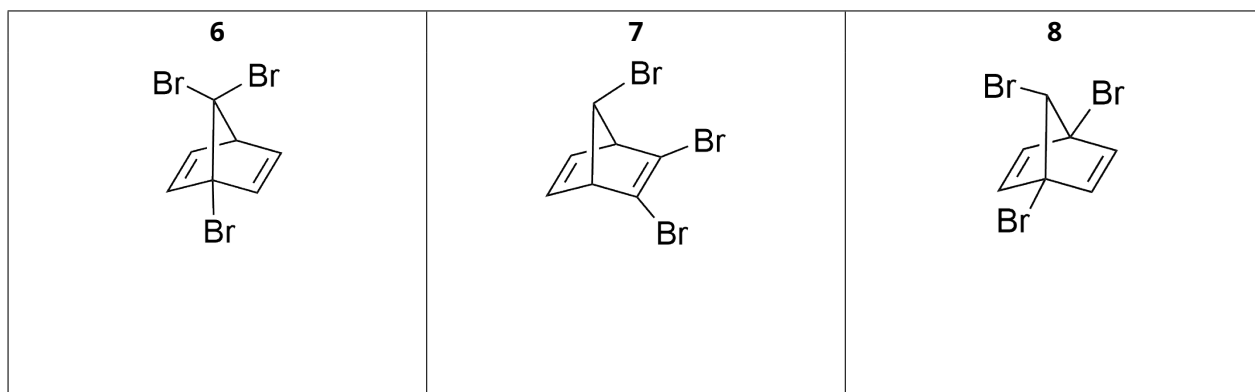
**4.3** (6.0 pt)

☐		☐	
☐		☐	
☐		☐	

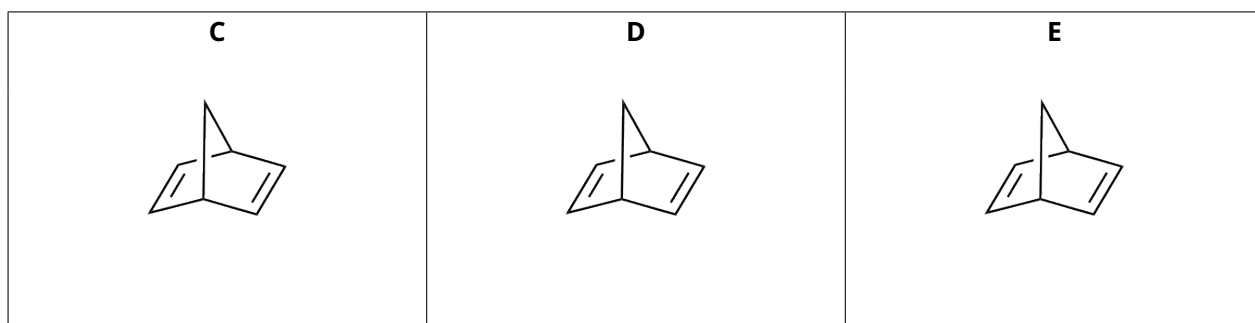
4.4 (16.0 pt)



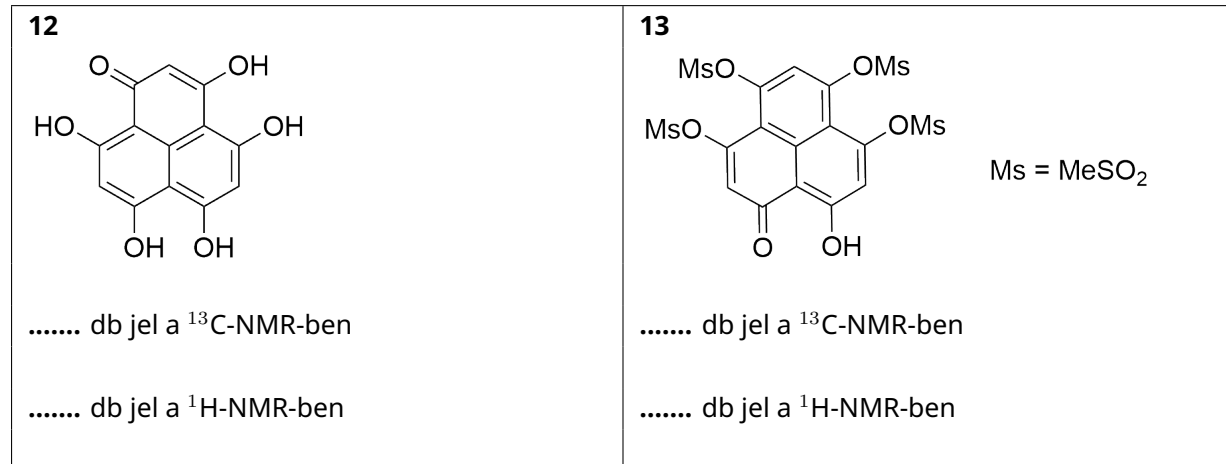
4.5 (9.0 pt)



4.6 (9.0 pt)



4.7 (8.0 pt)

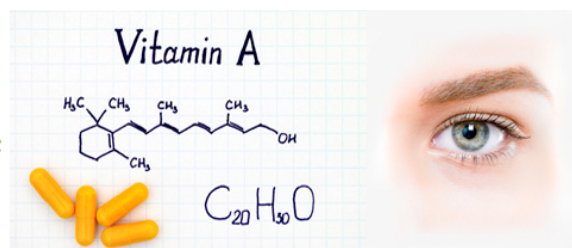




Q5-1

Hungarian (Hungary)

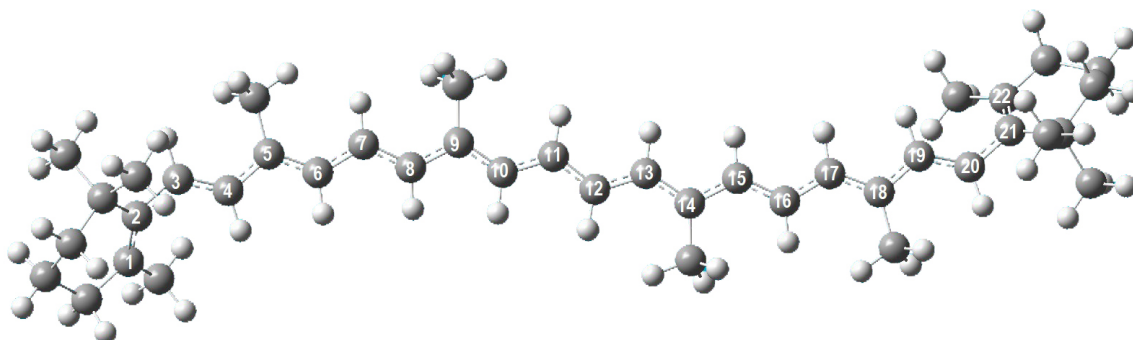
Konya, répa, béta-karotin, A-vitamin, immunrendszer, látás



Rúmi iszlám misztikus és költő Konyában élt a XIII. században. Tőle a kémiához úgy lehet eljutni, hogy Konya környéke adja a török répatermés 65 %-át. A répából meg A vitamint nyernek ki.

A répa narancssárga színét a β -karotin okozza. Ez a molekula egy narancsvörös természetes festékanyag, ami növényekben és gyümölcsökben is fellelhető. Ez a karotinoid A-vitaminná alakítható, ami a normális fejlődéshez és növekedéshez, az immunrendszer és a látás működéséhez elengedhetetlen.

A β -karotinban egy 22 szénatomból álló hosszú polién lánc található. Ebben a konjugált π -rendszerben egyszeres és kétszeres kötések váltakoznak. A karotin kísérletileg meghatározott elnyelési maximuma (λ_{max}) 455 nm hullámhossznál található. Tételezzük fel, hogy az összes kötés a C_1 és C_{22} között konjugált kötés. 22 π -elektron van a molekulában (1. ábra).



1. ábra A β -karotin szerkezeti modellje. A szürke és fehér gömbök a szén, illetve hidrogénatomok. A számozott atomok adják a molekula konjugált π -kötéses részét..

Egy durva közelítés szerint a molekula síkjára merőleges $C-2p_z$ pályákon található elektronok szabadon, kölcsönhatás nélkül mozoghatnak a teljes molekulában. Ez olyan, mintha az elektronok független részecskékként csak egy dimenzióban, az x tengely irányában mozoghatnának. Ebben az esetben a π -elektronok viselkedését a lehető legegyszerűbb modell, az egydimenziós **dobozba zárt részecske** modellel is lehet vizsgálni.



Q5-2

Hungarian (Hungary)

Az alábbi képletek az egydimenziós dobozba zárt elektron hullámfüggvényét és kvantált energiaszintjeit adják meg:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

itt n a kvantumszám, $n=1,2,3,4,\dots \infty$, és L a doboz hossza.

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8m_e L^2}$$

Két dimenzióban a független részecskemodell szerint a hullámfüggvény az egydimenziós hullámfüggvények szorzata lesz. Az energia pedig az egy dimenzióban kapott energiák összegeként kapható. A téglalap alakú, kétdimenziós doboz esetén az energiaszintek képlete:

$$E_{n_x, n_y} = \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right] \left\{ \frac{h^2}{8m_e} \right\}$$

ahol n_x, n_y a pozitív egész kvantumszámok. L_x, L_y a doboz méretei a 2D modellben.

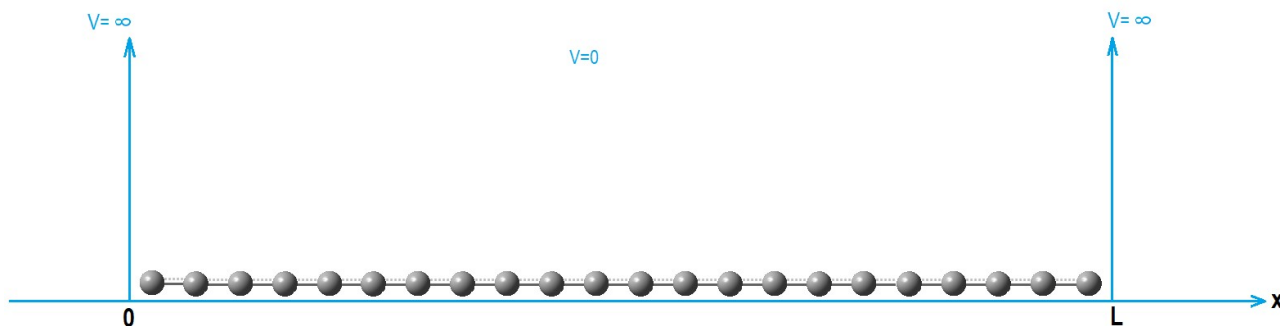
5.1 A lent megadott állítások közül melyik kettő helyes? Ahhoz az egyetlen 13.0pt
válaszhoz **tegyél X-t** a válaszlapon, amelyik a helyes kijelentéseket tartalmazza!

A β -karotin molekula azért narancsszínű, mert:

- i) az elektromágneses spektrum látható tartományában nyel el.
- ii) a HOMO $\rightarrow$ LUMO átmenetet egy IR foton elnyelése okozza.
- iii) a 22. és 23. energiaszint közötti különbség megegyezik egy narancssárga hullámhossznak megfelelő IR fotonnak.
- iv) a kék/zöld fényt elnyeli, és átengedi a piros/sárga színt.
- v) az UV-látható tartományban nyel el, mert a molekulának nincs eredő dipólusmomentuma.

Bár teljesen irreális, tételezd fel, hogy a molekula konjugált része lineáris! Írjuk le 2. ábrán mutatott módon az 1D dobozba zárt részecske modelljével! A doboz hosszát a $L=1,40 \times n_C$ adja meg Å egységben. Itt n_C a konjugált részletben található szénatomok száma.

Ezek alapján válaszold meg az 5.2–5.6 kérdéseket!



2. ábra A β -karotin konjugált részében található szénatomok vázlatos elrendeződése egy L hosszúságú 1D dobozban.

5.2 Számítsd ki a két legalacsonyabb energiaszint energiáit (J-ban)!

13.0pt



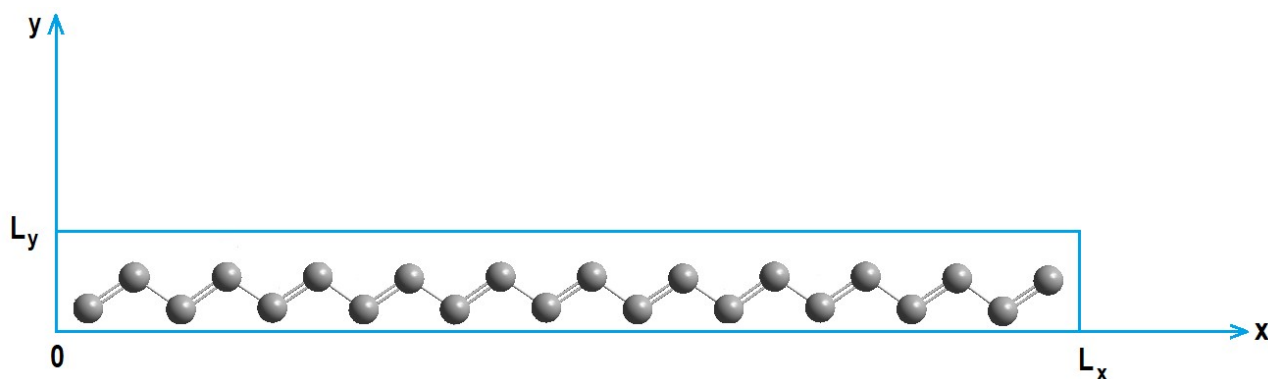
5.3 **Rajzold fel** a két legalacsonyabb energiaszint hullámfüggvényét! Az x-tengelyt címkézd fel! 15.0pt

5.4 **Vázold fel** az energiadiagramot $n = 4$ -ig nagyjából helyes relatív távolságokat feltüntetve! 8.0pt

5.5 **Számítsd ki** a molekula teljes π -energiáját (J-ban)! 12.0pt

5.6 **Számítsd ki**, hogy a legmagasabb betöltött és a legalacsonyabb betöltetlen pálya közötti átmenethez mekkora hullámhossz (nm-ben) tartozik! 10.0pt

Használd a 2D dobozba zárt részecske modelljét az 5.7–5.8 és kérdések megoldásánál!



3. ábra A β -karotin konjugált részében található szénatomok vázlatos elrendeződése 2D dobozban.

Tételezd fel, hogy a konjugált részben található kötések mind *transz*-helyzetűek. A π -elektronok mozgása egy $L_x = 26,0 \text{ \AA}$, $L_y = 3,0 \text{ \AA}$ (3. ábra) méretű, téglalap formájú 2D dobozban történik.

5.7 **Számítsd ki** a legmagasabb betöltött és a legalacsonyabb betöltetlen pálya e-energiáját (J-ban) és a kettő közötti átmenet hullámhosszát (nm-ben)! 17.0pt

5.8 Mennyi legyen L_x értéke ($\text{\AA}$ -ben), hogy a molekula a fényt a kísérleti $\lambda_{max} = 455 \text{ nm}$ -nál nyelje el, ha L_y továbbra is $3,0 \text{ \AA}$ marad? (Vedd mindenképp úgy, hogy a HOMO és LUMO pályák kvantumszámai ugyanazok, mint az 5.7. kérdésben) 12.0pt



Konya, répa, béta-karotin, A-vitamin, immunrendszer, látás

5.1 (13.0 pt)

- | | | | |
|--|---|--|--|
| ☐ a) i és ii | ☐ b) i és iii | ☐ c) i és iv | ☐ d) i és v |
| ☐ e) ii és iii | ☐ f) ii és iv | ☐ g) ii és v | ☐ h) iii és iv |
| ☐ j) iii és v | ☐ k) iv és v | | |

5.2 (13.0 pt)

Számolás:

5.3 (15.0 pt)



5.4 (8.0 pt)

5.5 (12.0 pt)



5.6 (10.0 pt)

Számolás:

5.7 (17.0 pt)

Számolás:



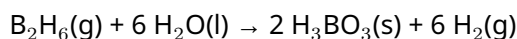
5.8 (12.0 pt)



Termodinamika egy csillagközi túrán

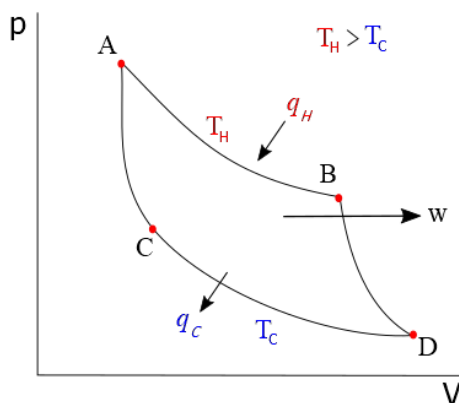
1. rész

Egy hipotetikus univerzumban diborán egy ismeretlen mennyisége vesz részt a következő reakcióban:



Feltételezzük, hogy ebben a hipotetikus univerzumban a reakcióból kapott $\text{H}_3\text{BO}_3(\text{s})$ -et 300 K-en teljesen szublimáltatták. A szublimációhoz szükséges energiát egy ideális hőerőgép **egy körfolyamata** által kifejtett munka szolgáltatta. A körfolyamatban egy mol egyatomos tökéletes gáz megy végig az alábbi nyomás (p) - térfogat (V) diagramon leírt cikluson:

- A $\rightarrow$ B; izoterm reverzibilis tágulás 1000 K (T_H) hőmérsékleten, aminek során a hőfelvétel egy hőforrásból 250 J (q_H).
- B $\rightarrow$ D; reverzibilis adiabatikus tágulás.
- D $\rightarrow$ C; izoterm reverzibilis összenyomás 300 K (T_C) hőmérsékleten, miközben hőleadás (q_C) történik egy hideg hőtartályba.
- C $\rightarrow$ A; reverzibilis adiabatikus összenyomás.

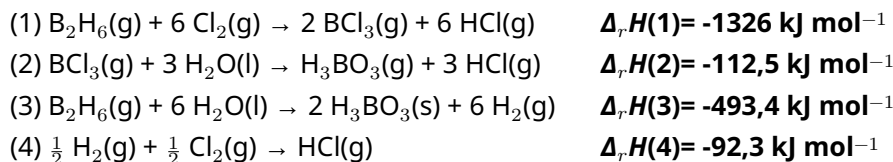


A hőcseréken felül megmaradó energia hasznosul mint munka (w). A q_H és q_C összefüggése T_C és T_H értékével a következő:

$$\frac{|q_H|}{|q_C|} = \frac{T_H}{T_C}$$

Egy körfolyamat hatásfokát úgy kaphatjuk meg, hogy a ciklus által végzett munkát (w) elosztjuk a ciklus által elnyelt hővel (q_H).

Ismerjük a következő reakciók entalpiaváltozását 300 K-en:



6.1 Számítsd ki a H_3BO_3 szublimációjának moláris entalpiaváltozását (kJ mol^{-1} -ban) 300 K-en. 5.0pt

6.2 Számítsd ki a $\Delta_r U$ (belsőenergia-változás) értékét kJ mol^{-1} mértékegységben 300 K-en a fenti (2) és (4) reakcióra (minden reakcióban minden gáznemű részecskére ideális gáz viselkedést tételezhetsz fel)! 12.0pt

6.3 Számítsd ki a hőerőgép által termelt összes munkát ($|w|$) J-ban és a hideg hőtárolóba kibocsátott hőt ($|q_c|$) J-ban! 6.0pt

6.4 Számítsd ki a fenti hőerőgép hatásfokát! 3.0pt

6.5 Számítsd ki a entrópiaváltozásokat (ΔS) a hőerőgép $A \rightarrow B$ és $D \rightarrow C$ folyamataira J K^{-1} mértékegységben! 6.0pt

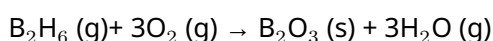
6.6 Számítsd ki a szabadentalpia-változásokat (ΔG) J-ban a hőerőgép $A \rightarrow B$ és $D \rightarrow C$ folyamataira! 6.0pt

6.7 Számítsd ki, hogy a körfolyamat A pontjában lévő nyomás hányszorosa a B pontban levő nyomásnak! 5.0pt

6.8 Számítsd ki, hogy a feladat elején megadott reakcióban mekkora anyagmennyiségű $\text{H}_2(\text{g})$ keletkezik (mólban) a hőerőgép egy ciklusát lefuttatva! 3.0pt

2. rész

Diborán rakétahajtóanyag felhasználásával csillagközi utazást lehet tenni. A diborán égése ezzel a folyamattal írható le:



Diboránt égettek különböző hőmérsékleteken egy 100 literes zárt csodaedényben, és feljegyezték az egyensúlyi helyzetben mérhető körülményeket.



	8930 K	9005 K
$B_2H_6(g)$	0,38 mol	0,49 mol
H_2O	0,20 mol	0,20 mol

Az $O_2(g)$ parciális nyomása mindegyik kísérlet folyamán állandó 1 bar értékre volt beállítva. Tegyük fel, hogy ebben a hipotetikus univerzumban $\Delta_r S^\circ$ és $\Delta_r H^\circ$ függetlenek a hőmérséklettől, a $B_2O_3(s)$ standard moláris entrópiája (S°) nem változik a nyomással. Továbbá minden gáz ideális gázként viselkedik, és minden anyag a reakció előtt, illetve után a megadott halmazállapotban lesz minden további bomlás nélkül az összes hőmérsékleten.

6.9 Számítsd ki K_p (a nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandó) értékét 8930 K és 9005 K hőmérsékleten! 8.0pt

6.10 Számítsd ki a reakció $\Delta_r G^\circ$ értékét $kJ\ mol^{-1}$ mértékegységben 8930 K és 9005 K hőmérsékleten!
(Ha nem sikerült kiszámítani, számolhatsz $K_p(8930\ K) = 2$, $K_p(9005\ K) = 0,5$ értékekkel) 6.0pt

6.11 Számítsd ki az égési reakció $\Delta_r G^\circ$ ($kJ\ mol^{-1}$), $\Delta_r H^\circ$ ($kJ\ mol^{-1}$), és $\Delta_r S^\circ$ ($J\ mol^{-1}\ K^{-1}$) értékét 298 K hőmérsékleten is!
(Ha nem sikerült kiszámítani, számolj $K_p(8930\ K) = 2$, $K_p(9005\ K) = 0,5$ értékekkel) 6.0pt

6.12 Jelöld meg a helyes választ a válaszlapon arra vonatkozóan, hogy az égési reakció kedvezményezett-e vagy sem egy adott hőmérsékleten és standard (1 bar) nyomáson! 8.0pt

6.13 Számítsd ki a a $H_2O(g)$ $\Delta_f H^\circ$ ($kJ\ mol^{-1}$) és S° ($kJ\ mol^{-1}\ K^{-1}$) értékét az alábbi táblázatban megadott adatokat felhasználva! ($\Delta_f H^\circ$ = képződési entalpia, S° = standard entrópia)
(Ha nem sikerült kiszámolni az égés $\Delta_r H^\circ$ és/vagy $\Delta_r S^\circ$ értékét, használhatod a $\Delta H^\circ = 1000\ kJ\ mol^{-1}$, $\Delta S^\circ = 150\ J\ K^{-1}\ mol^{-1}$ értékeket) 6.0pt

	$\Delta_f H^\circ(298\ K)$	$S^\circ(298\ K)$
$B_2H_6(g)$	$36,40\ kJ\ mol^{-1}$	$0,23\ kJ\ mol^{-1}\ K^{-1}$
$O_2(g)$	$0,00\ kJ\ mol^{-1}$	$0,16\ kJ\ mol^{-1}\ K^{-1}$
$B_2O_3(s)$	$-1273\ kJ\ mol^{-1}$	$0,05\ kJ\ mol^{-1}\ K^{-1}$



Termodinamika egy csillagközi túrán

6.1 (5.0 pt)

Itt számolj:

6.2 (12.0 pt)

Itt számolj:

6.3 (6.0 pt)

Itt számolj:



6.4 (3.0 pt)

Itt számolj:

6.5 (6.0 pt)

Itt számolj:

6.6 (6.0 pt)

Itt számolj:



6.7 (5.0 pt)

Itt számolj:

6.8 (3.0 pt)

Itt számolj:



6.9 (8.0 pt)

Itt számolj:



6.10 (6.0 pt)

Itt számolj:

6.11 (6.0 pt)

Itt számolj:

**6.12** (8.0 pt)

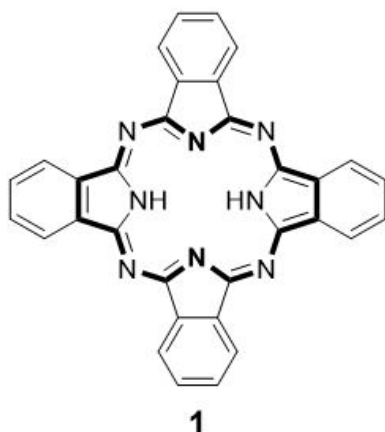
	Kedvezményezett	Nem kedvezményezett
298 K	☐	☐
8930 K	☐	☐
9005 K	☐	☐
9100 K	☐	☐

6.13 (6.0 pt)

Itt számolj:



Ftalocianinok

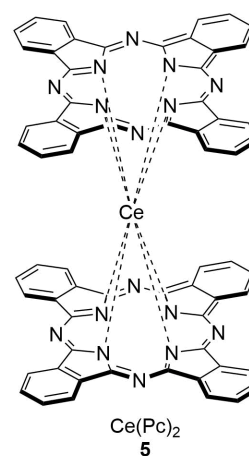
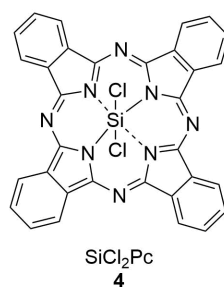
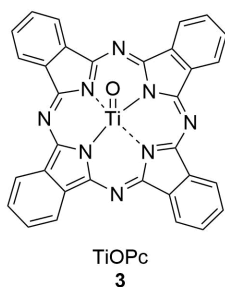
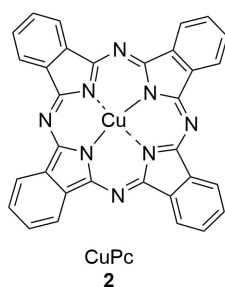


*Emeritus Professor Özer
Bekaroğlu*

A ftalocianin (továbbiakban Pc) kifejezés a görög "naphta" = kőolaj és a "cianin" = mélykék jelentésű szavakból eredeztethető. Özer Bekaroğlu török tudós végzett úttörő munkát a Pc kémiában Törökországban.

A fémmentes ftalocianin (**1**, H_2Pc) egy nagy, síkalkatú makrociklusos vegyület $(\text{C}_8\text{H}_4\text{N}_2)_4\text{H}_2$ összegképlettel.

7.1 Hány π -elektron van a fenti ábrán látható **1** H_2Pc molekula kivastagított régiójában? 4.0pt



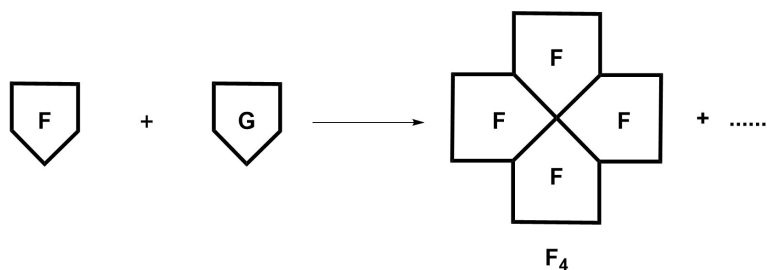


Azokat a Pc-kat, amelyek egy vagy két fémiont tartalmaznak, metalloftalocianinoknak (MPc) nevezik, és eltérő geometriákat tudnak mutatni, ahogy az ábra is mutatja.

7.2	Írd be a válaszlap táblázatába a 2-5 vegyületekben található központi ionok koordinációs számát!	8.0pt
7.3	Írd be a válaszlap táblázatába a 2, 3 és 5 vegyületekben található fémek (Cu, Ti, Ce) oxidációs számát!	6.0pt
7.4	Töltsd ki a válaszlap táblázatát, és jelezd a 2-5 vegyületek térszerkezetét!	8.0pt
7.5	Töltsd ki a válaszlap táblázatát a 2-5 vegyületek mágneses tulajdonságaival! • Használd a " p " betűt a paramágneses, és a " d " betűt a diamágneses tulajdonság jelzésére.	8.0pt
7.6	Add meg a 4 vegyületben található szilíciumion (Si) alapállapotú elektronkonfigurációját, és írd be az alapállapotú 2p elektronok minden kvantumszámát!	14.0pt

Fémmentes ftalocianint (**1**, H_2Pc) általában a ftalonitrilek ciklotetramerizációjával képeznek. A különféle szubsztituenseket tartalmazó Pc-ket aszimmetrikusnak nevezzük, ezeket két különféle ftalonitril statisztikus ciklizációjával állíthatjuk elő. Ennek a módszernek nincs szelektivitása, és a termék az összes lehetséges izomer keveréke.

7.7	Rajzold le az összes terméket, amely F és G statisztikus ciklizációjakor keletkezhet! Ha sztereoizomerek is vannak köztük, akkor jelöld őket <i>cisz-</i> és <i>transz-</i> címkével. • F és G két különböző szimmetrikus ftalonitril. • Az egyik termék az F₄ , ami a lenti képen látható. • A többi terméket is az F₄ ábrázolásához hasonlóan rajzold le!	19.0pt
-----	---	--------



A Pc-ket fényérzékenyítőként használják a rák fotodinamikus terápiájában (PDT), mivel ezek a látható tartományban erősen, nagy moláris abszorpciós koefficiensekkel nyelik el a fényt. A PDT-nek három alapvető összetevője van: **fényérzékenyítő**, fény és oxigén. Külön-külön ezek egyike sem toxikus, ám együttesen fotokémiai reakciót indítanak el, amelynek eredményeként citotoxikus szinglet oxigén (1O_2)



képződik, ami el tudja pusztítani a rákos sejteket.

(multiplicitás) $^1\text{O}_2$

- Egy energiaszint multiplicitása definíció szerint $2S+1$
- Ha a két spin parallel ($\uparrow\uparrow$), akkor $S = 1$, ha antiparallel ($\uparrow\downarrow$), akkor $S = 0$.

7.8 Rajzold le a szinglet állapotú dioxid legalacsonyabb energiájú állapotának molekularpálya (MO) diagramját, és **számítsd ki** a kötésrendet!
• Ebben az állapotban nincsenek párosítatlan elektronok! 12.0pt

7.9 Számítsd ki azt az energiát (kJ/mol mértékegységben), amely a triplet oxigénből ebbe a szinglet oxigén állapotba való átmenethez szükséges, ha a megfelelő gerjesztéshez szükséges fény hullámhossza 1270 nm! 6.0pt



Ftalocianinok

7.1 (4.0 pt)

A π -elektronok száma egy H_2Pc kivastagított régiójában:

7.2 (8.0 pt)

Központi ion	Rézion	Titánion	Szilíciumion	Cériumion
Koordinációs szám				

7.3 (6.0 pt)

Vegyület száma	2	3	5
Benne lévő fém oxidációs száma			

7.4 (8.0 pt)

Geometria	Vegyület
Oktaéderes	
Négyzetes prizma	
Négyzetes piramis	
Síknégyzetes	



A7-3

Hungarian (Hungary)

7.7 (19.0 pt)

Termékek:



A7-4

Hungarian (Hungary)

7.8 (12.0 pt)

MO diagram:

Kötésrend:

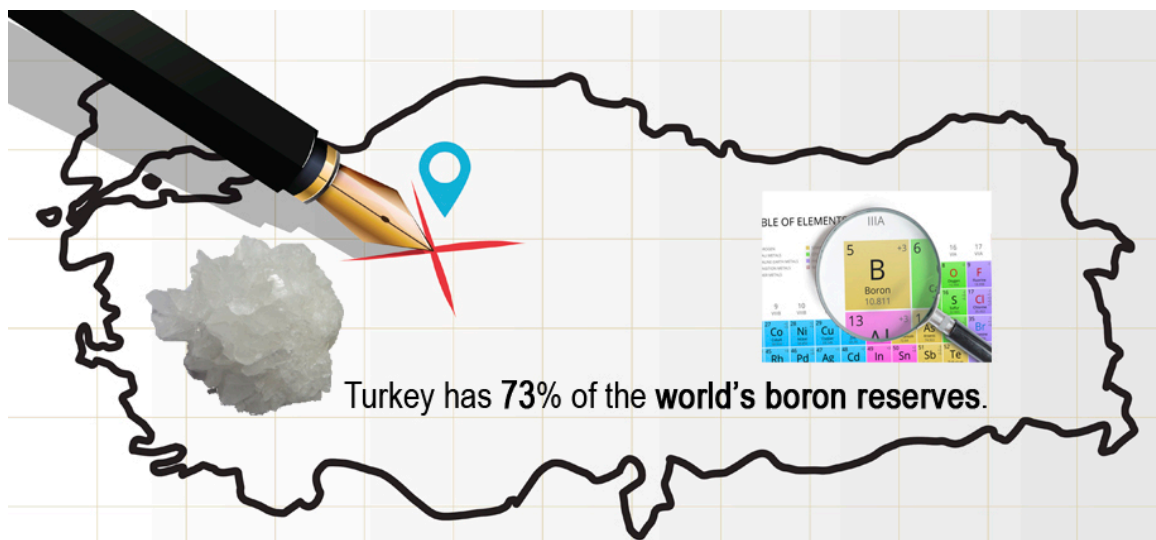
7.9 (6.0 pt)

Itt számolj:

Energia = kJ/mol



Bórvegyületek és hidrogéntárolás



A nátrium-borohidrid (NaBH_4) és az ammónia-borán (BNH_6) a legtöbbet tanulmányozott kémiai hidrogéntároló anyagok. Ebben a kérdésben a bór és a hidrogéntárolásra használt bórvegyületek kémiáját fogod megismerni.

A bórax ($\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot n\text{H}_2\text{O}$) Törökországban bányászott bórászvány (a cég neve ETI). A NaBH_4 előállítása során a vízmentes bóraxot fémnátriummal redukálják nagy nyomású hidrogénatmoszférában és szilícium-dioxid jelenlétében 700°C -on. Ez a Bayer-eljárás. A folyamat során az összes hidrogén a NaBH_4 -ba tárolódik el. Az ammónia-borán (BNH_6) viszont NaBH_4 és ammónium-szulfát száraz tetrahidrofuranban (THF) lejátszódó reakciójával állítható elő 40°C -on. **(Súgás:** a BNH_6 szintézis jól működő elszívás mellett végezendő, mert egy gyúlékony gáz az egyik melléktermék.) Míg a NaBH_4 ionos vegyület, az ammónia-borán egy Lewis sav és bázis adduktja.

8.1 Írd fel a NaBH_4 vízmentes bóraxból történő szintézisének rendezett egyenletét! 3.0pt

8.2 Írd fel az ammónia-borán NaBH_4 -ból történő szintézisének rendezett egyenletét! 3.0pt

8.3 Rajzold fel a BH_4^- ion és a BNH_6 molekula térszerkezetét! 4.0pt

8.4 Számítsd ki a NaBH_4 és a BNH_6 tömegszázalékos (m/m%) hidrogéntartalmát! 4.0pt

A két vegyületben tárolt hidrogént megfelelő katalizátor jelenlétében, szobahőmérsékleten végzett szolvólízis reakciókkal is fel lehet szabadítani. 1 mol NaBH_4 és 1 mol BNH_6 hidrolízisében 4, illetve 3 mol H_2 gáz szabadul fel, ezen felül metaborát, egy B-O kötések tartalmazó anion is keletkezik.



8.5 Írd fel a NaBH_4 és a BNH_6 hidrolízisének rendezett egyenleteit!

4.0pt

Egy egyszerű stabil bórvegyület a dibór-trioxid (B_2O_3). Léteznek összetett borátok is, mint pl. a gyűrűs B–O kötések tartalmazó $\text{B}_3\text{O}_6^{3-}$. Minthogy a B_2O_3 savas vegyület, vízzel könnyen bórsavat (H_3BO_3) ad. A B_2O_3 magas nyomáson és hőmérsékleten ammóniával a kétdimenziós szerkezetű bór-nitridet adja, amiben a váltakozó B és N atomok planáris grafitszerű síkokat alkotnak.

8.6 Írd fel a bórsav és a bór-nitrid megadott előállításainak rendezett egyenleteit!

4.0pt

8.7 Rajzold fel a $\text{B}_3\text{O}_6^{3-}$ ion, a bórsav és egy kétdimenziós bór-nitrid sík molekula-szerkezetét! **Súgás:** legalább 10 B atom látszódjon a bór-nitrid szerkezetben!

6.0pt

A B–H vegyületek, a boránok is fontos bórvegyületek. A legegyszerűbb stabil borán a diborán (B_2H_6), aminek pirolízisével más összetettebb boránok is előállíthatóak. A diborán egy bór-halid és egy hidrid-forrás metatézis reakciójával állítható elő.

8.8 Írd fel a diborán BF_3 és LiBH_4 reakciójával végzett előállításának rendezett egyenletét! **Súgás:** mindkét termék bórvegyület.

3.0pt

8.9 Rajzold fel a diborán molekula térszerkezetét! **Súgás:** a molekulában nincs B–B kötés.

2.0pt

A BH_3 (borán) instabil és nagyon reaktív. Ezért normális körülmények között nem lehet BH_3 formájában izolálni. Viszont szén-monoxiddal reagáltatva borán-karbonilként (BH_3CO) stabilizálható. Ez a vegyület a borán adduktja. A BH_3CO előállítása a boránok kémiája szempontjából fontos, mert jelzi, hogy a borán molekula is létezhet.

8.10 Vázold fel a BH_3CO Lewis-szerkezetét formális töltésekkel együtt!

3.0pt

8.11 A BH_3 és a CO között kialakuló kötés milyen hatással van a CO molekula C–O kötésére? Jelöld X-el a helyeset a válaszlapon szereplő állítások közül!

2.0pt

A borazin egyszeres és kétszeres kötések tartalmazó gyűrűs B–N egységekből, és az ezekhez kapcsolódó hidrogénatomokból épül fel, az összegképlete $\text{B}_3\text{N}_3\text{H}_6$, és izostrukturális a benzollal. A borazin egy kétlépéses eljárásban állítható elő, aminek része a borazin szimmetrikusan triszubsztituált klórszarmazékának ($\text{B}_3\text{N}_3\text{H}_3\text{Cl}_3$) előállítása az ammónium-klorid és bór-triklorid reakciójában, és az ezt követő $\text{B}_3\text{N}_3\text{H}_3\text{Cl}_3$ redukció LiBH_4 -del THF-ben.

8.12 Írd fel a THF (tetrahidrofurán) oldatban ammónium-kloridból kiindulva elvégzett borazinszintézis két lépésének rendezett egyenletét! **Súgás:** az egyik terméket THF stabilizálja Lewis sav-bázis addukt képzéssel!

4.0pt



- 8.13 Rajzold fel** a borazin és szimmetrikusan triszubsztituált klórszármazékának molekulaszervezetét! 4.0pt

A katalizátorok olyan anyagok, amelyek megnövelik a reakciók sebességét azáltal, hogy alacsonyabb energiájú reakcióutat nyitnak meg. A katalizátorok aktivitását általában az átviteli számmal (turnover frequency, TOF) jellemzik, aminek a kiszámításához elosztják a termék anyagmennyiségét az aktív katalizátor anyagmennyiségével és az idővel ($\text{TOF} = \frac{\text{mol termék}}{\text{mol katalizátor} \times \text{idő}}$). A BNH_6 egy hidrolízist 10,0 ml vízben játszották le. 100,0 mM volt a BNH_6 koncentráció és 5,0 mg CuPt/C katalizátort (CuPt ötvözet nanorészecskéi szén hordozón, 8,2 m/m% Pt atom) használtak. 67,25 ml hidrogéngáz keletkezett 5 perc alatt.

- 8.14** Tételezd fel, hogy a katalitikus reakciót "standard" körülmények (1 atm, 273,15 K) között játszották le. **Számítsd ki** a CuPt/C katalizátor TOF-jét **csak a Pt atomokra vonatkoztatva** a BNH_6 hidrolízisében keletkező hidrogéngáz térfogatát figyelembe véve! 4.0pt

Egy szintetikus Cu_xPt_y ötvözet (az indexek az atomok molarányát jelzik az ötvözetben) nanorészecskéinek kristályszerkezet-vizsgálatából kiderült, hogy a Cu_xPt_y kicserélődési ötvözet lapcentrált köbös elemi celláját Pt atomok alkotják, de az elemi cella lapjain található Pt atomok helyét Cu atomok vették át. Ezek alapján válaszolj a további kérdésekre!

- 8.15 Határozd meg** az ötvözet nanorészecskéinek összetételét, azaz találd meg, hogy mennyi x és y az ötvözet Cu_xPt_y összetételében! 2.0pt

- 8.16 Vázold fel** a Cu_xPt_y ötvözet elemi cellájának alakját, és jelöld be az atomok elhelyezkedését az elemi cellában! 2.0pt

- 8.17** Egy másik ötvözet összetétele Cu_2Pt_1 . Tételezd fel, hogy 380 pm élhosszú elemi cellája lapcentrált köbös, de benne a Cu és Pt atomok véletlenszerűen foglalják el az atomi pozíciókat. **Számítsd ki** az ötvözet sűrűségét g/cm^3 -ben! 4.0pt



Bórvegyületek és hidrogéntárolás

8.1 (3.0 pt)

8.2 (3.0 pt)

8.3 (4.0 pt)

8.4 (4.0 pt)



8.5 (4.0 pt)

8.6 (4.0 pt)

8.7 (6.0 pt)

$\text{B}_3\text{O}_6^{3-}$	Bórsav	Bór-nitrid



8.8 (3.0 pt)

8.9 (2.0 pt)

8.10 (3.0 pt)

**8.11** (2.0 pt)

- ☐ Hosszabb lesz, mert a BH_3 a CO-nak π -elektronokat ad vissza (π -back donation).
- ☐ Hosszabb lesz, mert a CO π -kötőelektronokat ad át a BH_3 -nak.
- ☐ Nem, vagy kicsi változás lesz, mert a CO elsősorban nemkötő elektronokat ad át a BH_3 -nak.
- ☐ Rövidebb lesz, mert a CO π^* lazító elektronokat ad át a BH_3 -nak.

8.12 (4.0 pt)**8.13** (4.0 pt)**8.14** (4.0 pt)



8.15 (2.0 pt)

8.16 (2.0 pt)

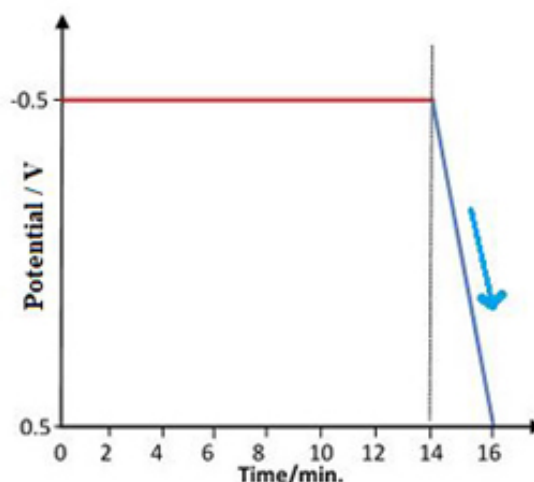
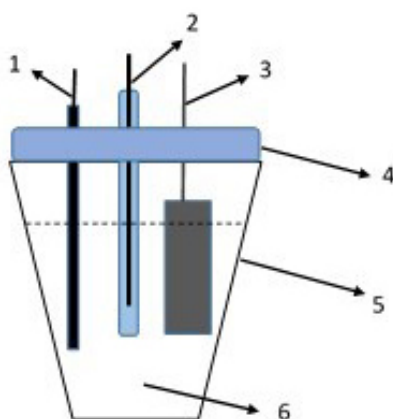
8.17 (4.0 pt)



Nehézfémek mérése

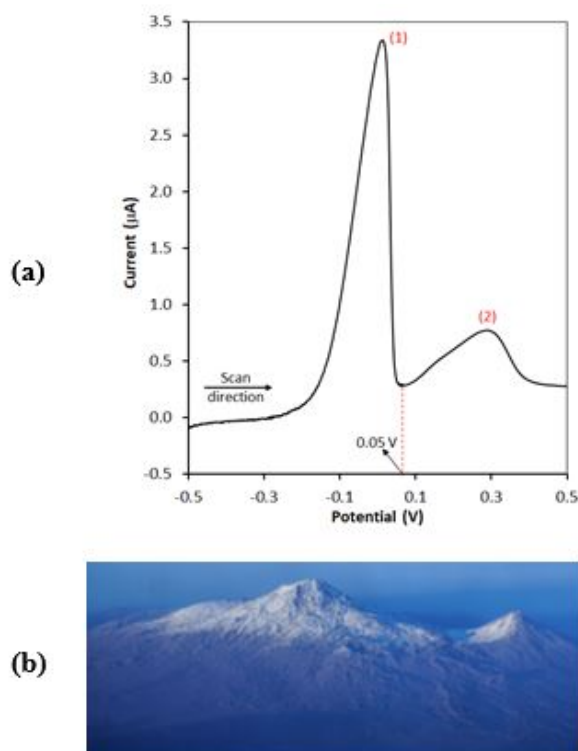
Egy gyár szennyvíztárolójában a következő lépések segítségével vizsgáltuk a nehézfémek mennyiségét. Az analízis során a hőmérséklet 298 K volt:

- 1. lépés)** Egy szennyvíz-medencéből öt különböző régióból 10-10 ml-es mintát vettünk, összekevertük egy 100 ml-es főzőpohárban, majd mágneses keverővel 5 percig kevertük.
- 2. lépés)** Egy 10 ml-es oldatrészletet kivettünk a 100 ml-es főzőpohárból, és keverés közben 142 mg of Na_2SO_4 -ot adtunk hozzá. Áttöltöttük az **1a** ábrán látható háromelektrodos mérőcellába. Ebben az elektrokémiai cellában egy Pt drót szolgált munkaelektrodként, egy Ag/AgCl (3 M KCl) elektród referencia elektródként míg egy Pt lemez segédelektrodként.
- 3. lépés)** Ezeket az elektródokat egy potenciosztárhoz csatlakoztattuk, és $-0,50$ V állandó potenciált alkalmaztunk az Ag/AgCl elektróddal szemben 14 percig, amint az az **1b** ábrán látható (vízszintes vonal). Feltételezzük, hogy 14 perc elegendő a várt elektrokémiai reakciók befejeződéséhez.



1. ábra. a) Az elektrokémiai cella elrendezése; 1) munkaelektrod (Pt drót), 2) referencia elektród (Ag/AgCl, 3M KCl), 3) áramvezető segédelektrod (Pt lemez), 4) zárókupak, 5) elektrokémiai cella, 6) 10 ml mintaoldat. **b)** A munkaelektrod potenciálváltozása az idő függvényében. y-tengely: potenciál/V Ag/AgCl-al szemben, x-tengely: idő/perc.

- 4. lépés)** Az elektródokat desztillált vízzel leöblítettük, egy másik elektrokémiai cellába helyeztük, ami 10 ml 0,1M H_2SO_4 oldatot tartalmazott, és a potenciált $-0,50$ és $+0,50$ V között szkenneltük az **1b** ábrán látható módon (2 percig lefelé lejtő vonal). Az e lépés során mért áram-potenciál adatokat a **2a** ábra szemlélteti, amely kissé erőltetett, de nem meglepő hasonlatosságot mutat az Ararát-hegy (*Ağrı Dağı*) távlati képével (**2b** ábra). Hogy kicsit kizökkenjete a feladatból, az Ararát-hegy Törökország legmagasabb csúcsa.

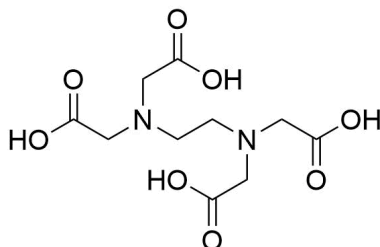


2. ábra a) A 0,1M H_2SO_4 oldatba merülő munkaelektrod potenciálváltoztatása során kapott áram-potenciál görbe, amit azután kaptunk, hogy a munkaelektrodot előzetesen 10 ml szennyvízmintában $-0,50$ V-on tartottuk (az **1b** ábra vízszintes szakaszának megfelelően). y-tengely: áram/ μA , x-tengely: potenciál/V Ag/AgCl elektróddal szemben, b) A Nagy- és Kis-Ararát csúcsának látképe.

5. lépés) Az 1. lépésben előkészített oldat újabb 10 ml-ét kivettük, és a 2. és 3. lépésben foglaltakat is ugyanebben a sorrendben elvégeztük rajta. Az elektródokat desztillált vízzel öblítettük és 10 ml 0,1M H_2SO_4 oldatba helyeztük. Ezután a munkaelektrod potenciálját konstans 0,05 V-on tartottuk 14 percig. Ismét feltételezzük, hogy 14 perc elegendő a várt elektrokémiai reakciók befejeződéséhez.

6. lépés) Az 5. lépés befejeztével a cellában lévő oldatot megfelelő kemencébe helyezve $150\text{ }^\circ\text{C}$ -on addig szárítottuk, míg száraz szilárd anyagot nem kaptunk.

7. lépés) 5 ml etilén-diamin-tetraecetsav (EDTA, H_4Y) (**3. ábra**) oldatot adtunk a 6. lépésben kapott szilárd maradékhoz és rázogatva feloldottuk. Tudjuk, hogy az EDTA 1 ml-e 3,85 mg/ml BaCO_3 -tal ekvivalens. Ezután az oldat pH-ját 10,0-re állítottuk. Az EDTA feleslegét 0,0010 M $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ mérőoldattal titráltuk vissza, melyből 95,60 ml fogyott a végpontig.

3. ábra Az EDTA (H_4Y) szerkezeti képlete

- H_2S -sel telített vízben, a $[H_2S]$ egyensúlyi koncentráció 0,1 M.
- $K_{sp}(NiS) = 4,0 \times 10^{-20}$; $K_{sp}(CuS) = 1,0 \times 10^{-36}$
- $K_{sav1}(H_2S) = 9,6 \times 10^{-8}$; $K_{sav2}(H_2S) = 1,3 \times 10^{-14}$

Reakció	E° / V (298 K)
$2H_2O(l) + 2e^- \rightarrow H_2(g) + 2OH^-(aq)$	-0,83
$Ni^{2+}(aq) + 2e^- \rightarrow Ni(s)$	-0,24
$2H^+(aq) + 2e^- \rightarrow H_2(g)$	0,00
$Cu^{2+}(aq) + 2e^- \rightarrow Cu(s)$	+0,34
$Ag^+(aq) + e^- \rightarrow Ag(s)$	+0,80
$O_2(g) + 4H^+(aq) + 4e^- \rightarrow 2H_2O(l)$	+1,23

9.1 A felsoroltak közül melyik illik az 1 és 2 csúcsra a **2a** ábrán? Tegyéél X-et a helyes válaszhoz a válaszlapon! 5.0pt

9.2 Mi történik, ha az **1b** ábrán mutatott -0,5 V helyett -1,2 V potenciált alkalmazunk az első (vízszintes) szakaszon? Tegyéél X-et a helyes válaszhoz a válaszlapon! 5.0pt

9.3 Számítsd ki a **2a** ábra adatainak kiméréséhez használt szkennelési sebességet mV/s mértékegységben 298K-en! 8.0pt

A következő galváncella cellapotenciálja 0,437 V.

$Pt, H_2(0,92 \text{ bar}) | HCl(1,50 \times 10^{-2} M), AgCl(tel) | Ag$

9.4 Számítsd ki az $AgCl(s) + e^- \rightarrow Ag(s) + Cl^-(aq)$ félcella-reakció standard elektródpotenciálját (V-ban) 298 K-en! 16.0pt
Figyelem: Minden számításodat írd le!

9.5 A válaszlapon melyik kijelentése adja meg az analízis 5. lépésének fő célját? Tegyéél X-et a helyes válaszhoz a válaszlapon! 5.0pt



- | | | |
|-----|--|--------|
| 9.6 | Írj rendezett ionegyenleteket a válaszlapon a 7. lépés komplexképzési és visszaitrálási reakciójára! | 6.0pt |
| 9.7 | Számítsd ki a gyár szennyvizének Ni^{2+} -koncentrációját mg/l mértékegységben. <i>Megjegyzés:</i> Minden számításodat írd le! | 25.0pt |
| 9.8 | Számítsd ki azt a legkisebb pH-értéket, ahol a Ni^{2+} -ionok csapadéka elkezd kiválni az 5. lépésben kapott oldatból, ha azt H_2S gázzal telítjük. Ha nem tudtad megoldani a 9.7. feladatot, számolj 20 mg/L Ni^{2+} -koncentrációval ebben a feladatban. <i>Figyu:</i> Minden számításodat írd le itt is! | 30.0pt |

**Nehézfémek mérése****9.1** (5.0 pt)

- ☐ 1. csúcs: Ni elektrokémiai redukciója / 2. csúcs: Cu elektrokémiai redukciója
- ☐ 1. csúcs: Cu elektrokémiai redukciója / 2. csúcs: Ni elektrokémiai redukciója
- ☐ 1. csúcs: Ni elektrokémiai redukciója / 2. csúcs: Cu elektrokémiai oxidációja
- ☐ 1. csúcs: Ni elektrokémiai oxidációja / 2. csúcs: Cu elektrokémiai oxidációja
- ☐ 1. csúcs: Cu elektrokémiai oxidációja / 2. csúcs: Ni elektrokémiai oxidációja

9.2 (5.0 pt)

- ☐ NO fejlődik
- ☐ NO₂ fejlődik
- ☐ Nitrogén fejlődik
- ☐ Oxigén fejlődik
- ☐ Hidrogén fejlődik

9.3 (8.0 pt)

Itt számolj:

Szkenelési sebesség = mV/s



9.4 (16.0 pt)

Itt számolj:

Standard elektródpotenciál = V

9.5 (5.0 pt)

- ☐ A Pt drót módosítása Ni-Cu ötvözetfilmmel
- ☐ A Pt drót módosítása Ni filmmel
- ☐ A Cu és Ni elektrokémiai leoldása (stripping) a Cu-Ni bevonatú Pt drótról
- ☐ A Cu elektrokémiai leoldása (stripping) a Cu-Ni bevonatú Pt drótról
- ☐ A Ni elektrokémiai leoldása (stripping) a Cu-Ni bevonatú Pt drótról

9.6 (6.0 pt)

Komplexbépzés:

Visszatitrálás:



9.7 (25.0 pt)

Itt számolj:

Ni²⁺ koncentráció: mg/L:



A9-4

Hungarian (Hungary)

9.8 (30.0 pt)

Itt számolj:

A minimális pH-érték: