

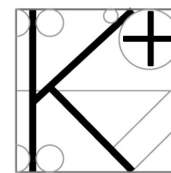
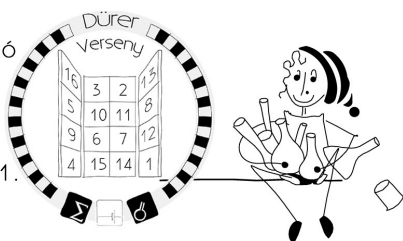
1. feladat

Adott **A** és **B** fém, melyek moláris tömegének összege x , szorzata y . Mindkét fém a nehézfémek közé tartozik. Az **A** fémet már az ókor óta ismeri az emberiség, és ennek megfelelően igen sokrétű felhasználásnak örvend, míg **B** fém viszonylag „fiatalabb” elem. Az **A** fémnek több stabil izotópja is van, míg a **B** fém esetén egyetlen stabil izotópról beszélhetünk. A **B** fémnek létezik oxosava, melynek egyik sója egy közismert erős oxidálószer. Mindkét fém vegyületet képez az oxigénnel, és mindkét esetben több stabil oxid lehetséges. Az **A** fém nem reagál vízzel, míg **B** fém negatív standard elektródpotenciálja miatt hideg vízben lassan, meleg vízben igen gyorsan oldódik hidrogéngáz felszabadulása közben.

- a) Mi lehet **A** és **B** fém, ha tudjuk, hogy a fentebb említett y és x hányadosa közel egyenlő a szilícium és a foszfor moláris tömegének számtani közepével?

Az **A** fémből x grammot 481,1 g tömény kénsavval (98,0 tömeg%-os) reagáltatunk. A megmaradt kénsavat a **B** fém dioxidjával reagáltatjuk, melyet az alábbi módon állíthatunk elő: **B** fémet vízzel reagáltatjuk, majd a kapott csapadékhoz szűrést követően salétromsavat adunk. A kapott vegyületet hevítve megkapjuk a kívánt dioxidot nitrogén-dioxid felszabadulása mellett.

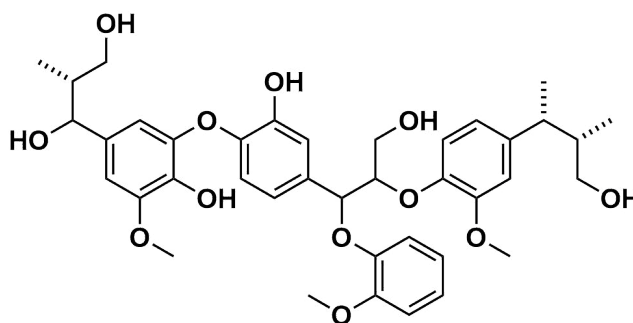
- b) Írjátok fel a **B** fém dioxidjának előállítását leíró reakcióegyenleteket, illetve az **A** fém reakcióját tömény kénsavval!
- c) Ha feltételezzük, hogy a **B** fém dioxidjából sztöchiometrikus mennyiséget reagáltattunk kénsavval, akkor hányszorosa az **A** fém tömege a dioxid előállításához szükséges **B** fém tömegének?



2. feladat

Napjainkban a motorhajtó anyagok között egyre nagyobb számban találunk zöld forrásból származókat. Az ilyen bioüzemanyagoknak nagy hátrányuk a viszonylag kis stabilitásuk, a savas kémhatásuk illetve a gyenge égési tulajdonságuk. Mégis világszerte komoly erőfeszítések zajlanak e területen, így lassan a bioolajok tulajdonságai megközelítik a hagyományos ásványi forrásból származó társaikét.

De miből is állítható elő bioolaj? Persze sokaknak első körben a sütőolaj jut az eszébe, de pl. faipari hulladékból is nyerhető ilyen anyag. Az egyik kiindulási anyag pl. a lignin, melyet oxigénmentes körülmények között elbontva különböző fragmenseket, többek között bioolajat is nyerhetünk. A következő képen egy lignin fragmens látható:



- a) Jelöljétek be és nevezzétek meg a benne található oxigéntartalmú funkciós csoportokat!

Mint láthatjátok, a ligninben - és így a belőle származó bioolajban - igen nagy mennyiségű oxigén található. Kutatások szerint ez az egyik oka az igen nagy instabilitásnak, így az oxigén eltávolítása különösen nagy fontosságú. Az ilyen kísérletekben igen fontos modellvegyület a gvajakol, amely egy monometoxi-fenol.

- b) Rajzoljátok fel a lehetséges szerkezeteket, majd válasszátok ki közülük, hogy melyik lehet a lignint legjobban modellező vegyület (a gvajakol)!

A hidrogénezési reakciókban "szerencsére" működik a szerves kémia kisördöge, így több lehetséges terméke is lehet a reakciónak. Emiatt a reakciókat jellemezhetjük különféle mennyiségekkel, melyek a keletkezett termékek mennyiségére utalnak. Ilyen mennyiség pl.: az egyes anyagok kitermelése, a reakció szelektivitása és a kiindulási anyag konverziója.

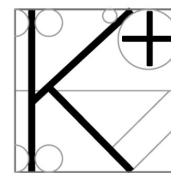
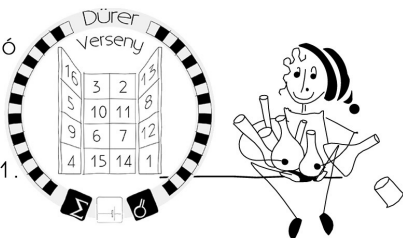
A konverzió (X) megmutatja, hogy a kiindulási anyag hány %-a alakult át.

$$X = \frac{\text{átalakult kiindulási anyag}}{\text{összes kiindulási anyag anyagmennyisége}} \cdot 100 \%$$

A kitermelést (y) és a szelektivitást (z) a következő módon számoljuk:

$$y = \frac{\text{adott termék anyagmennyisége}}{\text{átalakult kiindulási anyag anyagmennyisége}} \cdot 100\%$$

$$z = \frac{\text{adott termék mennyisége}}{\text{összes termék mennyisége}}$$

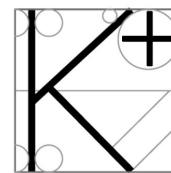
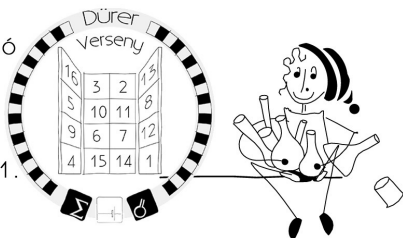


Egy, a lignin oxigénmentesítését modellező reakcióban a gvajakol híg, 3,00 $m/m\%$ -os n -dekános oldatát használjuk, ekkor a híg oldat fizikai tulajdonságai hibahatáron belül megegyeznek az oldószerével. A gvajakol oldatát egy katalizátorágyon vezetjük át 300 °C-on, miközben óránként egységnyi térfogatú mintát veszünk a kifolyó oldatból. A mintákat gázkromatográfiával analizáljuk, a mérések során a gvajakol és a reakció két termékének esetében áll rendelkezésünkre kalibráló görbe. Többfajta katalizátort is kipróbálunk, a következő eredményeket kapva:

A katalizátor				B katalizátor				C katalizátor			
c [g/l]				c [g/l]				c [g/l]			
t (h)	G	C.án	C.nol	t (h)	G	C.án	C.nol	t (h)	G	C.án	C.nol
1	1,000	5,259	0,350	1	0,350	8,458	-	1	1,250	11,258	0,984
2	1,250	6,278	0,660	2	0,400	10,268	-	2	1,600	11,358	0,990
3	1,250	11,250	1,250	3	0,390	10,250	-	3	1,300	11,550	1,000
4	3,500	5,325	5,368	4	0,380	10,250	-	4	1,450	11,680	1,260
5	8,000	1,258	9,500	5	0,360	10,250	-	5	1,350	11,230	1,250

A táblázatban a G a gvajakolt, a C.án a ciklohexánt, a C.nol a ciklohexanolt jelöli. Ahol nem található számérték, ott az adott anyag koncentrációja a készülék detektálási határa alatt van, ezt a számolások során közelíthetjük 0-val.

- Mennyi a reakció átlagos konverziója B, C katalizátor esetén (az n -dekán sűrűsége: 0,730 g/ml)?
- Mi okozhatja a konverzió romlását az A katalizátor esetén?
- Egy tesztreakcióban 5,00 ml/perc sebességgel áramoltatjuk keresztül a rendszeren a kiindulási anyag oldatát. Melyik katalizátort érdemes választani, ha minél több ciklohexánt akarunk előállítani? Indokoljátok választotokat!
- 30 g kiindulási anyagból (gvajakolból) mennyi ciklohexánt tudunk előállítani a választott katalizátorral?
- Jellemezzétek a katalizátorokat szelektivitás szempontjából! Melyik a legjobb?
- Milyen esetben érdemes a szelektivitás alapján dönteni, és mikor a kitermelés alapján?



3. feladat

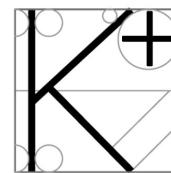
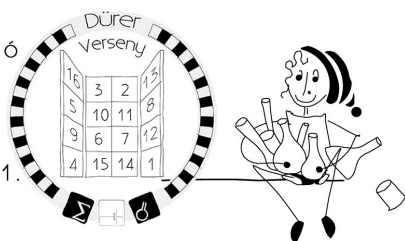
A borászatokban nyár végén, szeptember elején elkezdődik az év legmozgalmasabb időszaka, a szüret. A szüret időpontjának megválasztásához ún. próbaszüretekert végeznek, mely során leszednek néhány szőlőfürtöt az adott területről, kipréselik és a kinyert mustot analitikai vizsgálatoknak vetik alá. A must két nagyon fontos tulajdonsága az összes savtartalma, illetve a pH-ja.

A számítások során tételezzük fel, hogy a szőlőmustban csak borkősav található és ennek a kétértékű savnak a disszociációja felelős a must esetén mérhető pH értékért ($pK_1=2,89$ és $pK_2=4,40$). Egy must mintában a mérések azt mutatták, hogy az összes savtartalom $5,40$ g/l, a pH pedig $3,49$. Ez alapján milyen megfontolásokat érdemes tennünk?

- Számoljátok ki, hogy egy $3,49$ -es pH értékű borkősavoldat milyen koncentrációjú a borkősavra nézve!
- Fejezzétek ki, hogy egy $5,40$ g/l koncentrációjú borkősavoldat pH-ja mennyi? (harmadfokú egyenlet, megoldásáért pluszpont szerezhető)

Számításaink alapján látható, hogy egy $5,4$ g/l-es borkősavoldat pH-ja nem $3,49$. A sav oldatának modellje tehát nem jó, aminek az oka az, hogy a borkősav egy része só formájában van jelen. Tehát modellünket kationokkal kell kiegészítenünk, tételezzük fel, hogy a kationok káliumion formájában vannak jelen.

- Mennyi ezek alapján a káliumionok koncentrációja a mustban?



4. feladat

Hipotézisgyártó Hugónak az esti zuhanyozást élvezve az alábbi gondolata támadt: ez a tusfürdő már nem olyan illatos, mint amikor először használtam (és ennek meg már több hete). Mivel az illat valamilyen illékony anyagnak köszönhető, és az orrunkba jutva ez okoz illatélményt, emiatt valamilyen kipárolgásnak történnie kell a tusfürdőből, azaz az illatanyag fogy a tusfürdőből. Szóval akár meg is történhet, hogy ténylegesen veszít intenzitásából a tusfürdő.

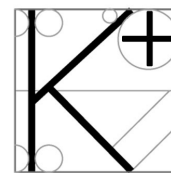
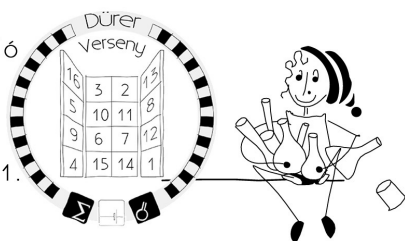
Az anyagok párolgását egy tenzió nevű jellemzővel írhatjuk le. A tenzió megmutatja, hogy az adott anyag párolgása során (ha elegendő idő eltelt, azaz beállt az egyensúly) mekkora parciális nyomást alakít ki a felette lévő gőztérben (és a parciális nyomások aránya megegyezik az anyagmennyiségek arányával). Igen gyakran használt illatanyag a 2-feniletanol, melyet kellemes virágillat jellemez. A 2-feniletanol tenziója szobahőmérsékleten (25,0 °C) 11,57 Pa.

Egy átlagos tusfürdő térfogata 250 ml, és takarékosan becsülve egy flakon kb. egy hónapig elég. Ezek alapján már ki tudjuk számolni, hogy tömegre és anyagmennyiségre mennyi 2-feniletanolnak kell fogynia ez idő alatt, de még egy-két egyszerűsítő tényezőt kell tennünk. Mivel kicsi a tenzió a normál légköri nyomáshoz képest, így a tusfürdőben uralkodó nyomást vehetjük normál légkörinek folyamatosan. Tekintsük úgy, hogy amikor fürdünk, az összes levegő kijön a flakonból a flakon töltöttségétől függetlenül, és az egyensúly két fürdés között mindig beáll (tehát mindig kialakul a 2-feniletanolnak megfelelő gőznyomás). Az eltelt egy hónapot vegyük 31 naposnak, a kiindulási 2-feniletanol koncentrációt pedig 40 µg/ml-nek.

- Rajzoljátok fel a 2-feniletanol szerkezeti képletét!
- Hány gramm és mol 2-feniletanol fogy az eltelt idő alatt párolgás útján a tusfürdőből? Lehet-e ez a fogyás annak az oka, hogy Hugó kevésbé érzi intenzívnek a tusfürdő illatát?
- Ha nem a 2-feniletanolt tekintjük modellanyagként, hanem a D-limonént (mely a narancsolajban előforduló fő komponens), melynek tenziója 1,98 Hgmm és 240 µg/ml a koncentrációja, akkor már elképzelhető Hugó elmélete? A D-limonén moláris tömege 136 g/mol.
- Hugónak eszébe jutott az is, hogy a tenzió nem tekinthető állandónak akkor, ha a koncentráció nagy mértékben változik. Ekkor a Henry törvény alapján közelíthető a koncentrációtól függő tenzió (p_B):

$$p_B = K_H^{Cp} \cdot c_B$$

A képletben a K_H^{Cp} a Henry-állandó, értéke D-limonén esetén szobahőmérsékleten (25 °C) 136,2 Pa m³ mol⁻¹. Számoljátok ki, hogy mennyi D-limonén párolog el az első 5 használat alatt!



5. feladat

Manapság a kémiai szintéziseknek egyre több elvárásnak kell megfelelniük. A folyamatos kutatás (mind akadémiai, mind ipari környezetben) számos új módszert eredményez. Az egyik ilyen fiatal módszer az áramlásos kémia, melynek fejlesztésében a magyar kutatóknak jelentős szerepe van. A mellékelt cikk egy szegedi kutatócsoport sikereit foglalja össze, olvassátok el és válaszoljatok a következő kérdésekre a cikk alapján!

- I) Írjátok fel az aldehidek azodikarboxilát-észterekkel történő alfa-aminálásának egyenletét! Milyen reakcióípusba sorolható a fenti reakció?
- II) Milyen kötéssel kapcsolódik a prolinalapú organokatalizátor a hordozóhoz?
- III) Írjátok fel a prolinalapú organokatalizátor képletét! Melyik molekularészlet okozhatja azt, hogy a katalizátorral enantioszelektív reakció végezhető? Jelöljétek a képletben!
- IV) Mi a kapcsolat az áramlási sebesség és tartózkodási idő között egy áramlásos oszlopreaktornál? Mekkora az oszlopreaktor térfogata, ha a kutatók úgy találták, hogy 4,5 ml/perces áramlási sebesség mellett a tartózkodási idő 198 másodperc?
- V) Rajzoljátok fel az alfa-hidrazino-aldehid képletét, ami racemizálódhat a hosszú kontaktidő alatt. Jelöljétek be rajta a királis szénatomot. Mi lehet az a racemizáció?
- VI) Lombikban elvégezve a reakciót, 70 %-os enantiomerfelesleggel játszódik le a reakció. Mi a két enantiomer aránya, ha az enantiomerfelesleget az alábbi képlet alapján számítjuk:

$$\text{enantiomer felesleg}(\%) = \frac{\text{enantiomer}_1 - \text{enantiomer}_2}{\text{enantiomer}_1 + \text{enantiomer}_2} \cdot 100\% \quad (1)$$

- VII) Írjátok fel az anilin rézkatalizált oxidatív homokapcsolásának egyenletét!
- VIII) Mit jelent, ha egy reakció 100 %-osan kemoszelektív?
- IX) A toluol forráspontja 110,6 °C. Mekkora nyomást kell alkalmazni a készülékben, hogy a diklórmétán (forráspontja légköri nyomáson 39,6 °C) fel tudjuk melegíteni 110,6°C-ra? A nyomás és a forráspont közti összefüggést a Clausius-Clapeyron egyenlet adja meg:

$$\ln \left(\frac{p_1}{p_2} \right) = - \frac{\Delta_{\text{párolgási}} H}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \quad (2)$$

$\Delta_{\text{párolgási}} H$ a diklórmétán moláris párolgási entalpiája. A hőmérséklet K-ben használandó a behelyettesítés során. Tudjuk még, hogy a diklórmétán forráspontja a Himalája tetején (légnomás: 33,0 kPa) 10,1 °C.

- X) Egy alfa-aminálást végző áramlásos reaktorban az áramlási sebesség 4,50 ml/perc. Mindkét kiindulási anyagot 0,64 mol/dm³-es diklórmétános oldatban adagoljuk az áramlásos reaktorba. Folyamatos működés mellett hány gramm terméket tudunk előállítani a készülékkel egy óra alatt, ha a termék moláris tömege 286 g/mol, és a termelés 92,0 %?

A feladatok során 4 értékes jeggyel számoljatok! A szükséges adatok a függvénytáblázatban megtalálhatóak! Mindegyik feladat részletesen indokolt megoldása 20 pontot ér. A feladatok megoldásához függvénytáblázat, számológép és íróeszközök használhatóak. Sikeres versenyzést kívánunk!