

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?

1. feladat megoldása

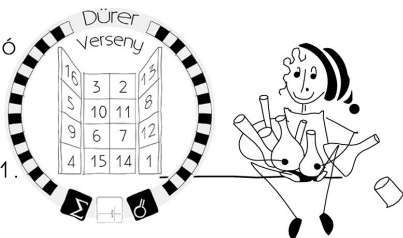
- a) A **B** elemről az adatok alapján valószínűsíthető lehet, hogy króm, vagy mangán. Mivel a krómnak több stabil izotópja van, ezért a **B** fém a mangán. A feladat alapján felírhatjuk a következő egyenleteket:

$$\frac{y}{x} = \frac{M_{Si} + M_P}{2} = \frac{28,09 + 30,97}{2} = 29,53$$

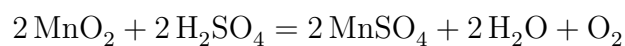
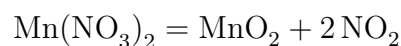
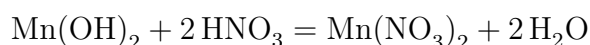
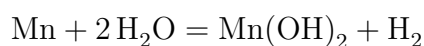
$$x = M_A + 55 \text{ és } y = M_A \cdot 55$$

$$\text{Tehát } 29,53 = \frac{y}{x} = \frac{M_A \cdot 55}{M_A + 55}$$

Az utolsó egyenletet megoldva M_A -ra 63,6 adódik, ez alapján az **A** fém a réz, ami megfelel a feladatban leírt tulajdonságoknak.



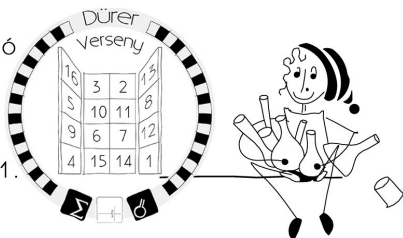
b) A lejátszódó reakciók:



- c) Az előző feladatrészt megoldásának ismeretében $x = 118,49$ g. Ez alapján a réz anyagmennyisége 1,8645 mol. Az egyenletből látszik, hogy a kénsavból kétszeres mennyiség (3,731 mol), azaz 365,91 g reagál a rézzel. Mivel összesen 471,5 g kénsav volt, ezért 105,6 g marad, ami 1,077 mol-nak felel meg.

1,077 mol kénsav 1,077 mol mangán-dioxiddal reagál, aminek előállításához szintén 1,077 mol mangán kell, aminek a tömege 59,16 g.

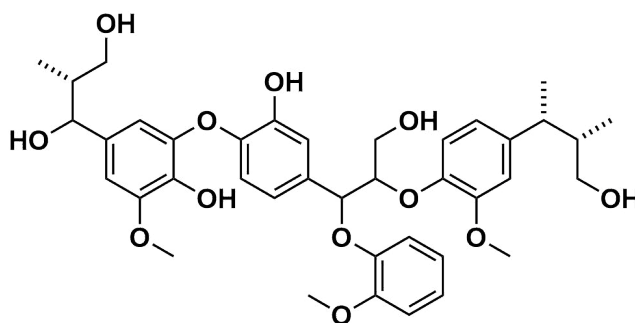
Tehát a **keresett hányados**: $118,49/59,16 = \mathbf{2,00}$.



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.

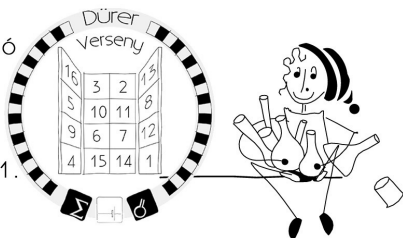
A konverzió (X) megmutatja, hogy a kiindulási anyag hány %-a alakult át.

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

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

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

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



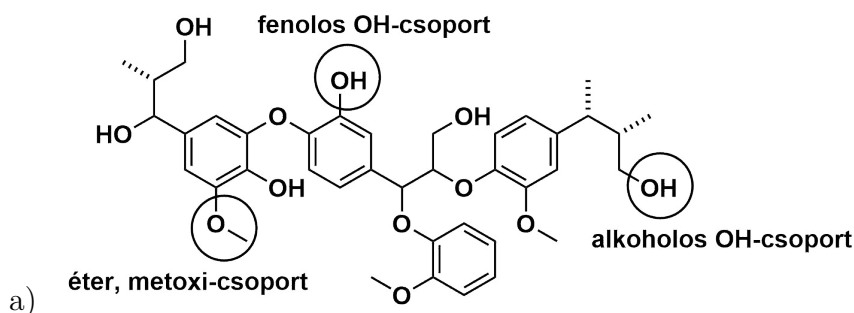
Egy, a lignin oxigénmentesítését modellező reakcióban a gvajakol híg, 3,00 $m/m\%$ -os n -dekános oldatát használjuk, ekkor a híg oldat fizikai tulajdonságai hibahatáron belül megegyeznek az oldószerével. A gvajakol oldatát egy katalizátorágyon vezetjük át 300 °C-on, miközben óránként egységnyi térfogatú 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:

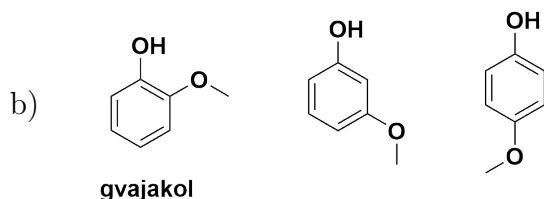
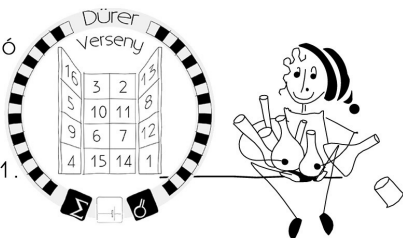
A katalizátor				B katalizátor				C katalizátor			
c [g/l]				c [g/l]				c [g/l]			
t (h)	G	C.án	C.nol	t (h)	G	C.án	C.nol	t (h)	G	C.án	C.nol
1	1,000	5,259	0,350	1	0,350	8,458	-	1	1,250	11,258	0,984
2	1,250	6,278	0,660	2	0,400	10,268	-	2	1,600	11,358	0,990
3	1,250	11,250	1,250	3	0,390	10,250	-	3	1,300	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?

2. feladat megoldása





Ha jobban megvizsgáljuk a lignin fragmens szerkezetét láthatjuk, hogy a fenolos OH- és a metoxi-csoport (fenil gyűrűhöz kapcsolódó oxigének) egymáshoz képes orto helyzetben találhatóak, következésképpen a gvajakol az orto-metoxifenol.

- c) Mivel a konverzió definíciója szerint anyagmennyiségekkel kell számolnunk, az egyes mintáknak pedig ugyanakkora a térfogata, érdemes minden esetben a koncentrációkat alkalmazni. Ehhez először is meg kell határoznunk a kiindulás oldatunk koncentrációját! Mivel az oldat elég híg ezért sűrűségét a n-dekánnal megegyezőnek tekinthetjük. A gvajakol moláris tömege: $M_{gvajakol} = 124 \text{ g/mol}$, tehát:

$$c = \frac{\frac{m_{gvajakol}}{M_{gvajakol}} \cdot 1000}{\frac{m_{oldat}}{\rho_{oldat}}} = \frac{\frac{3}{124} \cdot 1000}{\frac{100}{0,73}} = 0,1766 \text{ mol/dm}^3$$

Ha ezek után átszámoljuk a B, ill. C katalizátorok estén a visszamaradó gvajakol mennyiségét (amely csupán egy moláris tömeggel való osztásból áll) a következő eredményeket kapjuk:

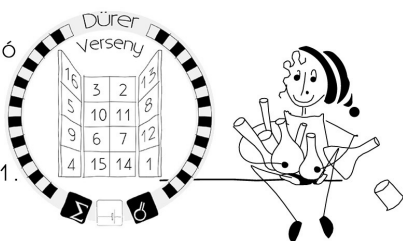
	Katalizátor	
	B	C
Idő / h	$c_{gvajakol} / \text{mol/dm}^3$	
1	0,002823	0,010081
2	0,003226	0,012903
3	0,003145	0,010484
4	0,003065	0,011694
5	0,002903	0,010887

Ezekből kiszámítható a konverzió a megadott definíció szerint:

$$X = \frac{n_{\text{átalakult}}}{n_{\text{kiindulási}}} \cdot 100\% \text{ azaz } X = \frac{c_{gvajakol,0} - c_{gvajakol,t}}{c_{gvajakol,0}} \cdot 100\%$$

	Katalizátor	
	B	C
Idő / h	X / %	
1	98,4	94,3
2	98,2	92,7
3	98,2	94,1
4	98,3	93,4
5	98,4	93,8

Azaz átlagban B katalizátor esetén a konverzió 98,3 %; míg C katalizátor esetén 93,7 %.



- d) Az A katalizátor adataiból látható, hogy nem tud egyenletes konverzióval dolgozni és a konverzió a 3. óra után nagy mértékben leromlik. A konverzió romlásának okai a következők lehetnek:
- A szemcsék aggregációja (szinterelődnek a fémrészecskék), ami csökkenti a felületet
 - Katalizátorméregként hathat az egyes képződő termék vagy köztitermék
 - Szennyeződés található a dekánban ami katalizátorméregként hat
 - Elszenesedik a kiindulási anyag, betömi a pórusokat, elfedi a katalizátort
- e) A kérdés megválaszolásához a táblázat teljes egészére ki kell számolni az óránkénti kitermeléseket, melyekre a következő értékek adódnak:

	Katalizátor	
	B	C
Idő / h	y / %	
1	57,9	81,9
2	63,6	81,4
3	70,3	83,4
4	70,3	83,9
5	70,2	75,7

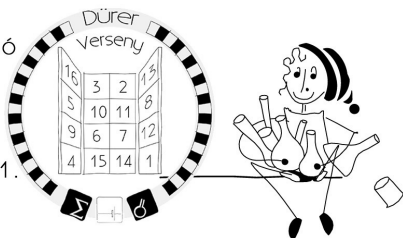
Ha áttekintjük a fentebb kiszámolt konverziókat, illetve a ciklohexánra vonatkozó termeléseket, láthatjuk, hogy a C katalizátor esetén kicsivel alacsonyabb konverzió mellett, de jóval magasabb kitermeléssel keletkezik ciklohexán. Tehát, ha minél több ciklohexánt akarunk előállítani, akkor a C katalizátort érdemes választani.

- f) 30 g kiindulási anyag (gvajakol) 1000 g oldatban található, ami a sűrűsége alapján 1370 ml oldatnak felel meg. Ez az oldattérfogat 1370/5, azaz 274 perc, vagyis 4,57 óra alatt megy át a reaktoron. A 4,57 órás reakcióidő azt jelenti, hogy legpontosabban akkor számolunk, ha az első 4 órás termelést külön számoljuk, ugyanis ezek egyenlő súllyal számítanak, míg az utolsó óra kisebb mértékben számít bele.

Az első 4 óra átlagos kitermelése 82,65 %, míg az 5. óráé 75,7 %. Az első 4 órában 26,26 g gvajakol alakul át, míg a maradék időben 3,74 g. Ezek alapján a következő anyagmennyiségű ciklohexán keletkezne 100 %-os konverzió esetén:

$$n_{\text{ciklohexán}, t_{1-4}} = \frac{\frac{m_{\text{gvajakol}}}{M_{\text{gvajakol}}}}{\frac{y_{1-4}}{100\%}} = \frac{\frac{26,26}{124}}{0,8265} = 0,1750 \text{ mol}$$

$$n_{\text{ciklohexán}, t_5} = \frac{\frac{m_{\text{gvajakol}}}{M_{\text{gvajakol}}}}{\frac{y_5}{100\%}} = \frac{\frac{3,74}{124}}{0,757} = 0,0228 \text{ mol}$$

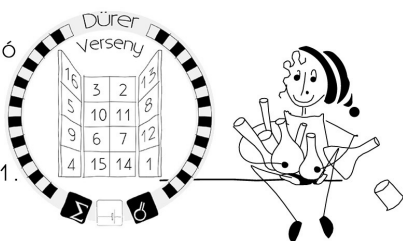


Tehát összesen 0,1978 mol ciklohexán keletkezne, mivel azonban a konverzió a C katalizátor esetén 93,7 %, ezért csak 0,1853 mol keletkezik, ami 15,57 g ciklohexánnak felel meg. A B katalizátor esetén is hasonló módon kell számolnunk, és akkor 13,21 g ciklohexánt kapunk. Tehát látható, hogy a C katalizátor a jobb választás.

- g) Szelektivitás szempontjából egyértelműen a B katalizátor tűnik jobbnak, hiszen nem keletkezik detektálható mennyiségben ciklohexanol, azonban keletkezhet más anyag, ami nincs benne a táblázatban. A konverziók és a ciklohexánra vonatkozó termelés alapján kiszámolható a katalizátorok szelektivitása.

Figyelembe véve, hogy a kezdeti gvajakol koncentráció 0,1766 mol/dm³ volt, megállapítható, hogy B katalizátor esetében átlagosan 0,1736 mol/dm³ átalakul ebből, a képződő ciklohexán mennyisége pedig 0,1178 mol/dm³. Tehát a reakció szelektivitása: $z = \frac{0,1178}{0,1736} = 0,6786$. A C katalizátor esetén ez a szám: $z = \frac{0,1142}{0,1655} = 0,6897$. Tehát a két katalizátor szelektivitása nagyjából megegyezik.

- h) Nyilván egy reakció esetén minél többet akarunk kapni a termékből, tehát első körben a kitermelés alapján választunk a különböző lehetőségek közül. Azonban abban az esetben, mikor az egyik melléktermék zavarja a munkánkat (a főtermék alkalmazása esetén például továbbalakításnál, forgalomba hozatalnál...), akkor előfordulhatnak olyan esetek mikor a szelektívebb módszer több hasznot rejt.



3. feladat

A borászatokban nyár végén, szeptember elején elkezdődik az év legmozgalmasabb időszaka, a szüret. A szüret időpontjának megválasztásához ún. próbaszüretekkel 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 savoldatának 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?

3. feladat megoldása

- Alkalmazzuk a következő jelöléseket:

$[H_2T]$ - protonált borkősav koncentrációja; $[HT]$ - egyszeresen deprotonált borkősav koncentrációja; $[T]$ - kétszeresen deprotonált borkősav koncentrációja; $[H]$ - hidrogénion koncentráció

Felírhatók a következő egyenletek:

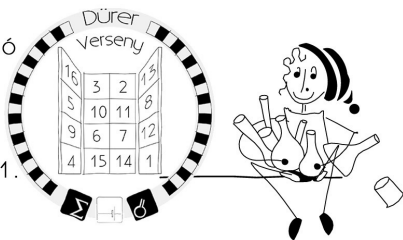
$$K_1 = \frac{[HT] \cdot [H]}{[H_2T]} \text{ illetve } K_2 = \frac{[T] \cdot [H]}{[HT]}$$

$$c_{sav} = [H_2T] + [HT] + [T] \text{ (anyagmérleg)}$$

Illetve a töltéseknek is meg kell egyezniük: $[H] = [HT] + 2 \cdot [T]$ (töltésmérleg)

A savi disszociációs állandók segítségével kifejezhető a $[T]$ és a $[HT]$ értéke csak $[H_2T]$ -t használva:

$$[HT] = \frac{K_1 \cdot [H_2T]}{[H]} \text{ illetve } [T] = \frac{K_1 \cdot K_2 \cdot [H_2T]}{[H]^2}$$



Ezeket behelyettesítve az anyagmérlegbe illetve a töltésmérlegbe:

$$c_{sav} = [H_2T] + [HT] + [T] = [H_2T] + \frac{K_1 \cdot [H_2T]}{[H]} + \frac{K_1 \cdot K_2 \cdot [H_2T]}{[H]^2}$$

$$[H] = [HT] + 2 \cdot [T] = \frac{K_1 \cdot [H_2T]}{[H]} + 2 \cdot \frac{K_1 \cdot K_2 \cdot [H_2T]}{[H]^2}$$

Mivel tudjuk, hogy a pH érték 3,49, ezért $[H] = 3,236 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$. Ezt behelyettesítve a töltésmérlegbe megkaphatjuk a $[H_2T]$ értékét, ami $6,458 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$ -nek adódik. Ezt behelyettesítve az anyagmérleg egyenletébe következik, hogy $c_{sav} = 3,561 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$, azaz 53,4 mg/l (0,053 g/l). Látható, hogy ez nincs összhangban a mért értékkel.

- b) A 5,4 g/l-es borkósavoldat megfelel 0,036 mol/l-es koncentrációjú borkósavoldatnak. Az előzőek szerint gondolkodva eljuthatunk a következő két egyenletig:

$$0,036 = [H_2T] + [HT] + [T] = [H_2T] + \frac{K_1 \cdot [H_2T]}{[H]} + \frac{K_1 \cdot K_2 \cdot [H_2T]}{[H]^2}$$

$$[H] = [HT] + 2 \cdot [T] = \frac{K_1 \cdot [H_2T]}{[H]} + 2 \cdot \frac{K_1 \cdot K_2 \cdot [H_2T]}{[H]^2}$$

Most $[H_2T]$ értékét ki kell fejeznünk a töltésmérlegből, és behelyettesíteni az anyagmérlegbe:

$$[H_2T] = \frac{[H]}{\frac{K_1}{[H]} + 2 \cdot \frac{K_1 \cdot K_2}{[H]^2}}$$

$$\text{és } 0,036 = \left(1 + \frac{K_1}{[H]} + \frac{K_1 \cdot K_2}{[H]^2} \right) \cdot \left(\frac{[H]}{\frac{K_1}{[H]} + 2 \cdot \frac{K_1 \cdot K_2}{[H]^2}} \right)$$

$$\text{rendezve: } 0 = [H]^3 + K_1 \cdot [H]^2 + (K_1 \cdot K_2 - K_1 \cdot 0,036) \cdot [H] - 0,072 \cdot K_1 \cdot K_2$$

A harmadfokú egyenletet megoldva: $[H] = 6,262 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$ azaz pH = 2,20. Itt sem kaptunk egyezést.

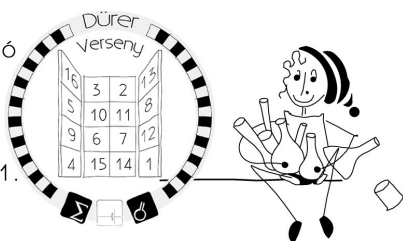
- c) A töltésmérleg fog módosulni: $[H] + [K] = [HT] + 2 \cdot [T]$

Szintén hasonló módon a következő egyenletrendszerhez juthatunk el:

$$0,036 = [H_2T] + [HT] + [T] = [H_2T] + \frac{K_1 \cdot [H_2T]}{[H]} + \frac{K_1 \cdot K_2 \cdot [H_2T]}{[H]^2}$$

$$[K] + [H] = [HT] + 2 \cdot [T] = \frac{K_1 \cdot [H_2T]}{[H]} + 2 \cdot \frac{K_1 \cdot K_2 \cdot [H_2T]}{[H]^2}$$

Mivel ismerjük a pH értékét, könnyen meghatározható az anyagmérleg segítségével a $[H_2T]$ értéke, ami $6,53 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$ -nek adódik. Ezt behelyettesítve a töltésmérlegbe $[K]$ -ra 0,0324 mol/l adódik, amit beszorozva a kálium moláris tömegével 1266 mg/l-es káliumion koncentrációt jelent.



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.

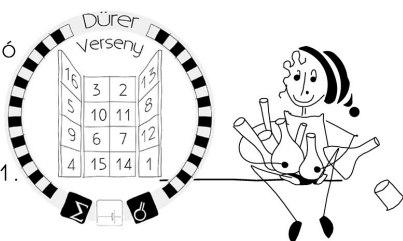
Az anyagok párolgását egy tenzió nevű jellemzővel írhatjuk le. A tenzió megmutatja, hogy az adott anyag párolgása során (ha elegendő idő eltelt, azaz beállt az egyensúly) mekkora parciális nyomást alakít ki a felette lévő gőztérben (és a parciális nyomások aránya megegyezik az anyagmennyiségek arányával). 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.

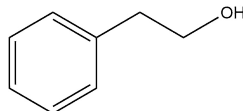
- Rajzoljátok fel a 2-feniletanol szerkezeti képletét!
- Hány gramm és mol 2-feniletanol fogy az eltelt idő alatt párolgás útján a tusfürdőből? Lehet-e ez a fogyás annak az oka, hogy Hugó kevésbé érzi intenzívnek a tusfürdő illatát?
- Ha nem a 2-feniletanolt tekintjük modellanyagként, hanem a D-limonént (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!



4. feladat megoldása



a)

- b) A feladtleírás alapján a tusfürdős flakon térfogata 250 cm^3 , az eltelt idő 31 nap. Ez alapján a naponta elhasznált tusfürdő mennyisége:

$$V_{\text{napi}} = \frac{V_{\text{össz}}}{t} = \frac{250 \text{ cm}^3}{31 \text{ nap}} = 8,06 \text{ cm}^3/\text{nap} = 8,06 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{nap}$$

Minden nap ekkora térfogattal csökken a flakonban lévő tusfürdő mennyisége, és ennyivel nő felette a gőztér. Emiatt a k . nap után pontosan k -szor ekkora térfogatú lesz a gőztér. A hőmérsékletet tekinthetjük $25 \text{ }^\circ\text{C}$ -nak, a 2-feniletanol tenziója $11,57 \text{ Pa}$. Ez alapján már felírhatjuk a tökéletes gáztörvény módosított formáját:

$$n_{\text{knapután}} = \frac{p \cdot k \cdot V_{\text{napi}}}{R \cdot T} = \frac{11,57 \text{ Pa} \cdot k \cdot 8,06 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3}{8,314 \frac{\text{Pa} \cdot \text{m}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298,15 \text{ K}} = k \cdot 3,764 \cdot 10^{-8} \text{ mol}$$

31 nap után már nem marad tusfürdő a flakonban, tehát csak 30 napra kell vizsgálnunk a kipárolgó anyagmennyiség mennyiségét. Így az alábbi írhatjuk fel:

$$n_{\text{össz}} = \sum_{k=1}^{30} n_{\text{knapután}} = \sum_{k=1}^{30} k \cdot 3,764 \cdot 10^{-8} \text{ mol} = 3,764 \cdot 10^{-8} \text{ mol} \cdot (1 + 2 + \dots + 30) = 3,764 \cdot 10^{-8} \text{ mol} \cdot \frac{1+30}{2} \cdot 30 = 3,764 \cdot 10^{-8} \text{ mol} \cdot 465 = 1,750 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$$

Tehát ekkora anyagmennyiség párolog el a tusfürdőből egyhavi használat alatt. A 2-feniletanol moláris tömege (122 g/mol) alapján már kiszámolható az elpárolgó illatanyag tömege is:

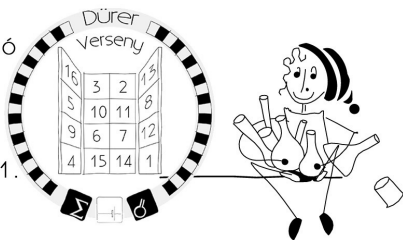
$$m_{\text{össz}} = M \cdot n_{\text{össz}} = 122 \text{ g/mol} \cdot 1,750 \cdot 10^{-5} \text{ mol} = 2,138 \text{ mg}$$

- c) Át kell váltanunk a Hgmm-t Pa-ba, a váltószám a függvénytáblázatban megtalálható ($1 \text{ Hgmm} = 133,32 \text{ Pa}$), így a D-limonén tenziója $263,98 \text{ Pa}$. A számolás menete azonos az előzővel, már csak az eredményeket adjuk meg:

$$n_{k \text{ nap után}} = k \cdot 8,588 \cdot 10^{-7} \text{ mol}$$

$$n_{\text{össz}} = 3,994 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

$$m_{\text{össz}} = 54,31 \text{ mg}$$



- d) A naponta elhasznált tusfürdő mennyisége azonos az eddigiekkel ($8,06 \text{ ml/nap} = 8,06 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{nap}$), a megadott koncentrációt érdemes átszámítani mol/m^3 dimenzióba a számítások egyszerűsítése kedvéért. Így a koncentráció

$$c_0 = \frac{240 \text{ } \mu\text{g/ml}}{136 \text{ g/mol}} = 1,765 \frac{\mu\text{mol}}{\text{ml}} = 1,765 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

A korábbi részekben már feltételeztük, hogy az első napon - mivel tele van a flakon - párolgással nem csökken az illatanyag mennyisége. Először a második használat alkalmával csökken, hiszen ekkor van gáztér a flakonban. A Henry törvény alapján a tenzió:

$$p_2 = K_H^{Cp} \cdot c_0 = 136,2 \frac{\text{Pa} \cdot \text{m}^3}{\text{mol}} \cdot 1,765 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} = 240,4 \text{ Pa}$$

A tenzióból számolható az elpárolgó anyagmennyiség:

$$n_{p2} = \frac{p_2 \cdot V}{RT} = \frac{240,35 \text{ Pa} \cdot 8,06 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3}{8,314 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)} \cdot 298,15 \text{ K}} = 7,820 \cdot 10^{-7} \text{ mol}$$

A második használat után a flakonban maradó tusfürdő térfogata $250 - 2 \cdot 8,06 = 233,9 \text{ ml}$. Ha nem lenne párolgás, ennek koncentrációja továbbra is $1,765 \text{ mol/m}^3$ lenne. A párolgás miatt a koncentráció csökken, mégpedig az elpárolgott mennyiség és a megmaradó térfogat hányadosával:

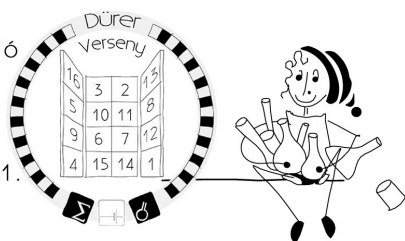
$$c_2 = 1,765 - \frac{7,820 \cdot 10^{-7}}{2,339 \cdot 10^{-4} \text{ l}} = 1,762 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

$$\text{így } p_3 = K_H^{Cp} \cdot c_2 = 136,2 \frac{\text{Pa} \cdot \text{m}^3}{\text{mol}} \cdot 1,762 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} = 240,0 \text{ Pa}$$

A harmadik használat esetén is hasonlóan kell számolni, arra kell ügyelni, hogy az elpárolgó anyagmennyiség számolásánál a térfogat minden használat során nő. A további eredményeket táblázatban foglaljuk össze:

	$n_{\text{párl}} / \mu\text{mol}$	$V_{\text{tusfürdő}} / \text{ml}$	$c_{\text{párl}} / \text{mol m}^{-3}$	$c_{\text{új}} / \text{mol m}^{-3}$	Tenzió / Pa
2. használat	0,782	233,9	0,0032	1,762	240,0
3. használat	1,561	225,8	0,0069	1,755	239,0
4. használat	2,333	217,7	0,0107	1,744	237,6
5. használat	3,092	209,6	0,0148	1,730	235,8

Az elpárolgott anyagmennyiségeket összeadva megkapjuk a kért eredményt, melynek értéke $7,768 \cdot 10^{-6} \text{ mol}$, azaz $1,06 \text{ mg}$.



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 reakciótípusba 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:

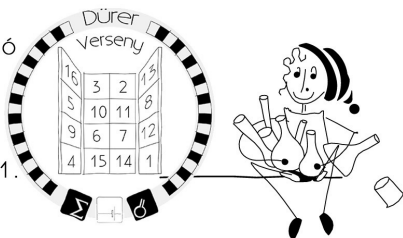
$$\text{enantimerfelesleg}(\%) = \frac{\text{enantimer}_1 - \text{enantimer}_2}{\text{enantimer}_1 + \text{enantimer}_2} \cdot 100\% \quad (1)$$

- 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 diklórmetánt (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:

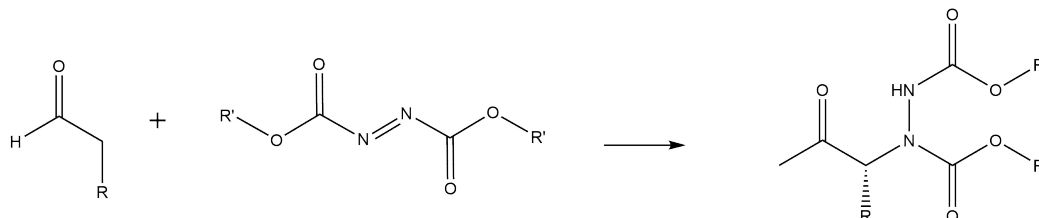
$$\ln \left(\frac{p_1}{p_2} \right) = - \frac{\Delta_{\text{párolgási}}H}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \quad (2)$$

$\Delta_{\text{párolgási}}H$ a diklórmetán moláris párolgási entalpiája. A hőmérséklet K-ben használandó a behelyettesítés során. Tudjuk még, hogy a diklórmetán 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 diklórmetános 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 %?



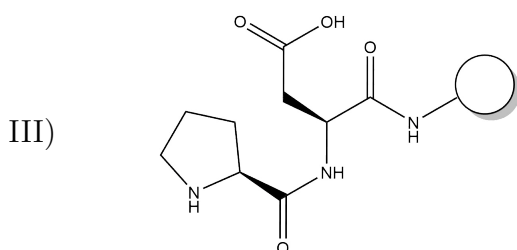
5. feladat megoldása



I)

A reakció típusa: addíció.

II) peptidkötéssel

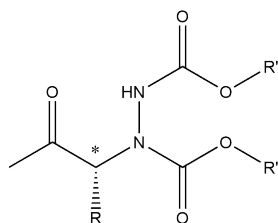


III)

A két királis részlet miatt lehetséges az enantio-
szelektív reakció.IV) Fordítottan arányosak egymással, minél nagyobb az áramlási sebesség, annál kisebb a
tartózkodási idő. A térfogat:

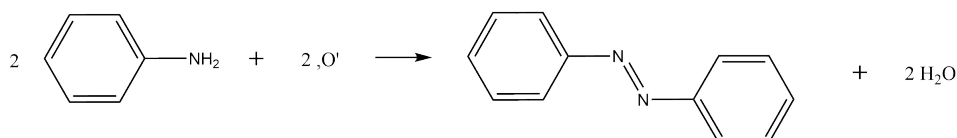
$$V_{\text{oszlopreaktor}} = \frac{v_{\text{áramlási}}}{60} \cdot t_{\text{tartózkodási}} = \frac{4,5}{60} \cdot 198 = 14,85 \text{ ml}$$

V)

A racemizáció az a folyamat, amely során az egyik enan-
tomer a másikba alakul.VI) Legyen az egyik enantiomerből 1, a másikból x . Ekkor:

$$\text{enantiomerfelesleg (\%)} = \frac{1 - x}{1 + x} \cdot 100\%$$

Megoldva azt kapjuk, hogy a két enantiomer aránya 1:0,176-hoz.

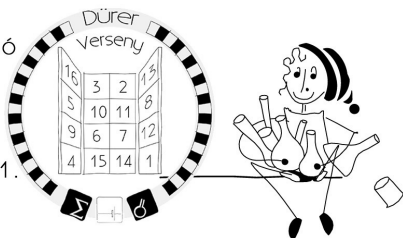


VII)

VIII) Azt jelenti, hogy a folyamat során csak az egyenlet termék oldalán szereplő anyagok
keletkeznek, azaz nem jár melléktermék képződéssel a folyamat.IX) A diklórmetán Himalája tetején, illetve légköri nyomáson mért forráspontjait behelyet-
tesítve megkapható a folyadék moláris párolgási entalpiája. Utóbbit felhasználva pedig
újabb behelyettesítéssel megkapható, hogy $7,46 \cdot 10^5$ Pa nyomást kell alkalmazni a ké-
szülékben.

Helyi forduló

2016.
november 11.



Kémia megoldókulcs

9 - 12. osztályosok



- X) 60 perc alatt 270 ml oldat áramlik át a rendszeren. Ez mindkét kiindulási anyagból 0,1728 mol-t tartalmaz, ami 100 %-os termelés esetén 0,1728 mol terméket szolgáltat. A termelés 92 %, így összesen 0,159 mol termék képződik, ami 45,5 g anyagot jelent.

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!

a szervezők