



1. feladat

Egy 50 V/V% nitrogént, 30 V/V% szén-dioxidot és 20 V/V% szén-monoxidot tartalmazó gázelegyet 1,00 atm össznyomáson telítettségig oldunk vízben (10 °C-on). 1,00 kg víz a gázelegyből (normál állapotban mérve) 373 ml-t abszorbeál. Az oldott gázelegyet a vízből eltávolítjuk, így az összetétele 96 V/V% CO₂, 2,5 V/V% N₂ és 1,5 V/V% CO lesz.

- Adjátok meg az egyes komponensek adott parciális nyomáshoz tartozó oldhatóságát normál ml gáz/kg víz mértékegységben!
- Adjátok meg a komponensek 1 atm nyomásra vonatkozó oldhatóságát 10 °C-on mg/kg víz mértékegységben!

Megoldás:

- A gázok térfogatszázalékos összetétele alapján kiszámolhatók az oldhatóságok. Az egyes gázok százaléktértékét beszorozva az össztérfogattal megkapjuk az oldhatóságokat: N₂: 9,4 ml/kg víz, CO₂: 358 ml/kg víz és CO: 5,6 ml/kg víz.
- Az elnyelt gáz térfogata alapján 16,64 mmol. Az összetételadatok alapján ebből 0,42 mmol nitrogén, 15,97 mmol szén-dioxid és 0,25 mmol szén-monoxid. Figyelembe kell venni, hogy a parciális nyomások miatt az a) részben számolt oldhatóságok nem 1 atm-ra vonatkoznak. Minden oldhatóságot be kell szorozni 100/ x -szel, ahol x az adott gáz V/V%-os aránya a kiindulási gázelegyből. Így az oldhatóságok: N₂: 0,83 mmol/kg víz, CO₂: 53,26 mmol/kg víz és CO: 1,25 mmol/kg víz. A feladat szerint viszont mg/kg víz egységben kell megadnunk az eredményt, így be kell szorozni az értékeket a moláris tömeggel.
Tehát az oldhatóságok: N₂: 23,2 mg/kg víz, CO₂: 2343,4 mg/kg víz és CO: 35,0 mg/kg víz.

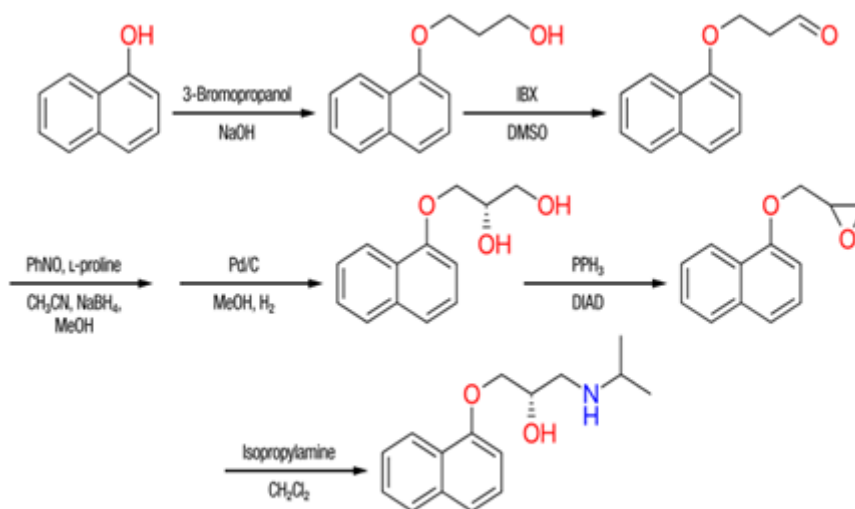
2. feladat

A magas vérnyomás Magyarországon mintegy 2,5 millió embert érint. Az egyik legelterjedtebb gyógyszer típus ennek kezelésére a béta-blokkoló, amelyet vízhajtókkal együtt szedve az enyhe és mérsékelt magas vérnyomás esetén érhető el javulás.

Az első klinikailag jelentős béta-blokkolót, a propranololt 1962-ben J.W. Black fedezte fel. Ezt az anyagot többek között 1-naftolból, 3-brómpropanolból és izopropil-aminból állítják elő (számos egyéb reagens mellett). Manapság a hatóanyag propranolol-hidrokloridként van jelen a gyógyszeriparban.

Egy 200 mg tömegű tableta hatóanyagtartalma 20,0 tömegszázalék, egy "levélen" 10 db tableta található és egy dobozban 3 darab "levél" van. Egy doboz gyógyszerhez elegendő hatóanyagot szeretnénk előállítani.

Megjegyzés: A propranolol-hidroklorid a propranolol HCl-dal alkotott sóját jelöli. A reakciók során a résztvevő vegyületeket 1:1 anyagmennyiség arányban mérjük be. Termelés alatt azt értjük, hogy a kiindulási anyagok anyagmennyisége alapján kiszámolt maximális mennyiség hány százalékát sikerült a valóságban előállítani.



- Hány g 1-naftolból és hány cm^3 3-brómpropanolból (25°C -on $\rho = 1,537 \text{ g/cm}^3$) induljunk ki, ha tudjuk, hogy a teljes gyártási folyamat során 30,0 %-os volt a termelés?
- Hány cm^3 izopropil-amin (25°C -on $\rho = 0,694 \text{ g/cm}^3$) szükséges a reakcióhoz, ha az utolsó reakciólépésnél 85,0 %-os volt a termelés?



Megoldás:

- a) $M(\text{propranolol}) = 16 \cdot 12 + 2 \cdot 16 + 14 + 21 = 259 \text{ g/mol}$
 $M(\text{propranolol-hidroklorid}) = 259 + 36,5 = 295,5 \text{ g/mol}$
Egy darab 200 mg-os tabletta hatóanyaga 40 mg ($200 \cdot 0,2$), ami $\frac{0,04 \text{ g}}{295,5 \text{ g/mol}} = 1,354 \cdot 10^{-4}$ mol.
30 %-os a termelés, tehát $\frac{1,354 \cdot 10^{-4}}{0,3} = 4,512 \cdot 10^{-4}$ mol propranololnak megfelelő kiindulási anyag kell. Mivel 1 mol 1-naftol reagál 1 mol 3-brómpropanollal, és abból 1 mol termék keletkezik, így:
 $n(1\text{-naftol}) = n(3\text{-brómpropanol}) = 4,512 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$
 $M(1\text{-naftol}) = 144 \text{ g/mol} \rightarrow m(1\text{-naftol}) = 0,0650 \text{ g}$
 $M(3\text{-brómpropanol}) = 139 \text{ g/mol} \rightarrow m(3\text{-brómpropanol}) = 0,0627 \text{ g}$
 $\rho(3\text{-brómpropanol}) = 1,537 \text{ g/cm}^3$
 $V(3\text{-brómpropanol}) = 0,0408 \text{ cm}^3$

Ezen adatok alapján könnyen kiszámolható, hogy az egy dobozban található 30 db tabletta hatóanyag előállításához 1,95 g 1-naftol és 1,22 cm³ 3-brómpropanol szükséges.

- b) $n(\text{hatóanyag}) = 1,354 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$
termelés: 85 % $\rightarrow \frac{1,354 \cdot 10^{-4}}{0,85} = 1,593 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$ termékkel kell számolni.
1 mol termékhez 1 mol izopropil-amin kell, tehát $n(\text{izopropil-amin}) = 1,593 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$.
 $M(\text{izopropil-amin}) = 59 \text{ g/mol} \rightarrow m(\text{izopropil-amin}) = 9,40 \cdot 10^{-3} \text{ g}$
 $\rho(\text{izopropil-amin}) = 0,694 \text{ g/cm}^3 \rightarrow V(\text{izopropil-amin}) = 0,0135 \text{ cm}^3$

Tehát egy doboznyi gyógyszer előállításához 0,405 cm³ izopropil-amin szükséges.



3. feladat

A biokémiai laborunkban az egyik, gyakran alkalmazott indikátor a fenolvörös, melynek átcsapási tartománya 6,8-as és 8,2-es pH között van. Savas közegben sárga, lúgos közegben élénk rózsaszín. Sajnos a laborban nincs internet, így nem tudjuk megnézni a fenolvörös K_s értékét, amire pont szükségünk lenne egy méréshez, így kénytelenek vagyunk azt gyorsan, kísérleti úton, spektrofotometriával meghatározni.

A **spektrofotometria** egy fényabszorpción alapuló mennyiségi analízis. A spektrofotométerben a mintán fényt vezetünk át, aminek egy része a híg oldatban elnyelődik. Ismerjük a bemenő, illetve a mintából kilépő fény intenzitását, melyek hányadosának tízes alapú logaritmusát az **abszorbancia** (A). Az abszorbancia és az oldat koncentrációja között egyenes arányosság áll fent (Lambert-Beer törvény):

$$A = \epsilon \cdot l \cdot c$$

ahol c az oldat koncentrációja, l a kuvetta (vagyis a fény útjának) hossza cm-ben (a továbbiakban minden mérés esetén 1 cm), ϵ pedig a moláris abszorpciós együttható. Az összefüggés csak híg oldatokra érvényes.

Mérésünk során először egy kalibrációs görbét készítünk, az optimális hullámhosszon mért abszorbanciát ábrázoljuk a koncentráció függvényében. A mérést 6+1 minta esetén végezzük el, melyek összetételét az első táblázat tartalmazza. A pH-t egy puffer segítségével 9,8-as értékre állítjuk be (így a fenolvörös csak anionos formában (A^-) van jelen).

Minta	Puffer	0,1 mmol/dm ³ -es fenolvörös oldat	Desztillált víz	[A ⁻]	Abszorbancia
VAK	4 ml	0 ml	1 ml	0	0
1.	4 ml	0,1 ml	0,9 ml		0,112
2.	4 ml	0,2 ml	0,8 ml		0,187
3.	4 ml	0,4 ml	0,6 ml		0,386
4.	4 ml	0,6 ml	0,4 ml		0,662
5.	4 ml	0,8 ml	0,2 ml		0,845
6.	4 ml	1,0 ml	0 ml		1,052

- Adjátok meg mmol/dm³-ben a táblázat utolsó előtti oszlopából hiányzó koncentrációkat a hígítás alapján!
- Miért alkalmazzuk a VAK mintát, amely nem tartalmaz fenolvöröst?
- Készítsétek el a kalibrációs görbét milliméterpapíron (abszorbancia-koncentráció függvény)! Illesszettek a pontokra egy origón áthaladó egyenest! Adjátok meg (jó közelítéssel) az egyenes egyenletét!

Továbbiakban az egyenes meredekségét (vagyis a moláris abszorpciós együtthatót) vegyétek 52,81 dm³/mmol/cm-nek!

- Mekkora egy 0,0379 mmol/dm³ anionkoncentrációjú oldat abszorbanciája? Mekkora az anionkoncentrációja annak az oldatnak, amelynek az abszorbanciája 1,585?



Hogy a K_s értéket meghatározzuk, a következő mérést eltérő pH-n (eltérő pufferek), azonos bemérési koncentrációval végezzük. A minták összetételét a második táblázatban láthatjátok, melyek elkészítéséhez ugyanazt a 0,1 mmol/dm³-es fenolvörös oldatot használtuk.

Minta	pH	Puffer	Deszt. víz	Fenolvörös	Abszorbancia	[A ⁻]	[HA]	pK _s
VAK	7,2	4 ml	1 ml	0 ml	0	0	0	-
1.	7,2	4 ml	0,5 ml	0,5 ml	0,113			
2.	7,6	4 ml	0,5 ml	0,5 ml	0,189			
3.	7,8	4 ml	0,5 ml	0,5 ml	0,236			
4.	8,0	4 ml	0,5 ml	0,5 ml	0,325			
5.	8,4	4 ml	0,5 ml	0,5 ml	0,436			
6.	8,6	4 ml	0,5 ml	0,5 ml	0,460			

- e) Adjátok meg a második méréshez tartozó anionkoncentrációkat mmol/dm³-ben a Lambert-Beer törvény segítségével!
- f) Számoljátok ki a „maradék”, nem disszociált fenolvörös (HA) koncentrációját!
- g) Számoljátok ki a Henderson-Hasselbalch egyenlet segítségével az egyes minták esetén a pK_s értékeket, és azok átlagából a keresett K_s értéket!

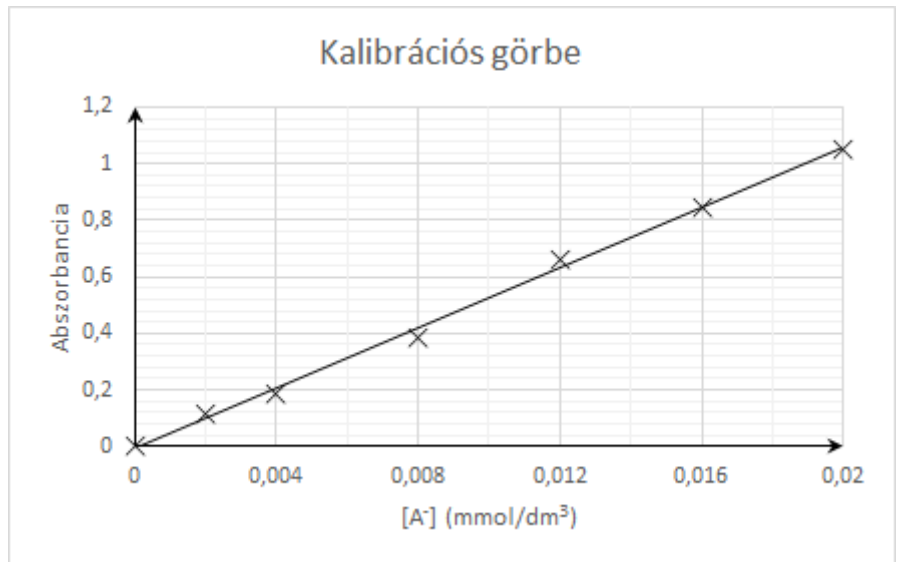
$$\text{Henderson-Hasselbalch egyenlet: } \text{pH} = \text{pK}_s + \lg \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

Megoldás:

a)

[A ⁻]	Abszorbancia
0	0
0,002	0,112
0,004	0,187
0,008	0,386
0,012	0,662
0,016	0,845
0,020	1,052

b) A VAK lesz a viszonyítási pont (0), ezzel kiszűrjük a fenolvörösön kívüli anyagok abszorbanciáját.



c)

d) $m = 52,81$ ezáltal $A = 52,81 \cdot c$
 $c = 0,0379 \text{ mmol/dm}^3$ tehát $A = 2,00$
 $A = 1,585$ tehát $c = 0,0300 \text{ mmol/dm}^3$

e) és f)

pH	Abszorbancia	$\frac{A}{52,81} = [A^-]$	$c_{\text{bemérési}} - [A^-] = [HA]$	$\lg \frac{[A^-]}{[HA]}$	$\text{pH} - \lg \frac{[A^-]}{[HA]} = \text{p}K_s$
7,2	0	0	0	-	-
7,2	0,113	0,0021	0,0079	-0,565	7,765
7,6	0,189	0,0036	0,0064	-0,254	7,854
7,8	0,236	0,0045	0,0055	-0,093	7,893
8,0	0,325	0,0062	0,0038	0,204	7,796
8,4	0,436	0,0083	0,0017	0,675	7,725
8,6	0,460	0,0087	0,0013	0,830	7,770
				Átlag:	7,800

g) $K_s = 10^{-\text{p}K_s} = 1,583 \cdot 10^{-8}$



4. feladat

Utónium professzor munkásságáért kitüntetést és egy arany-ezüst ötvözetből készült érmét kapott a Nemzetközi Szövetségtől. Kíváncsi kémikusunk az ötvözet összetételét szeretne volna meghatározni ún. gravimetriás, azaz tömegmérésen alapuló eljárással. Ez a módszer nagyfokú pontosságot igényel, azonban Utónium professzor precizitásával a feladat egyszerűen kivitelezhető. Az érméből 1,01 g-os mintát vett, melyet tömény salétromsavban oldott fel. A keletkezett oldathoz 1 mol/dm³-es sósav-oldatot öntött, fehér csapadék keletkezett. A levált csapadékot leszűrte, majd megfelelő körülmények között szárította, végül pedig lemérte a tömegét, mely 0,783 g-nak adódott.

- Írjátok fel a lejátszódó reakciók egyenletét!
- A tiszta arany 24 karátos, minden 1 karát 4,167 m/m% aranytartalomnak felel meg. Hány karátos volt az érme?

Utónium professzor, csalódván érméje értéktelenségében, úgy döntött, hogy megmaradt részét is tudományos kísérleteihez használja fel. Az érméből újabb, 1,03 g-os mintát vett, melyet ismét tömény salétromsavban oldott. A keletkezett oldatot indifferens lúggal, NaOH-dal semlegesítette, az elegy végső térfogata 15 cm³ lett. Ehhez 10 cm³ 1 mol/dm³-es HCl-oldatot öntött, majd a levált csapadékot 18 cm³ 2 mol/dm³ töménységű ammónia-oldatban oldotta fel.

- Írjátok fel a csapadék feloldásának egyenletét!
- Mennyi lett a keletkező oldat pH-ja? A térfogatokat tekintsük additívnak.
- Az 1,03 g-os minta oldása során keletkező nitrózus gázokat hány köbcentiméter vízbe kell vezetni ahhoz, hogy 0,602-es pH-jú oldatot kapjunk? Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy az oldás során csak NO₂ keletkezett, melynek oldása 100 %-os volt. A keletkező savakat egyértékű, 100 %-ban disszociáló stabil vegyületeknek tekintjük.
- Az e) részben meghatározott koncentrációjú oldat mekkora mennyiségét kell a d) részben meghatározott pH-jú oldathoz önteni, hogy a keletkező rendszer semleges kémhatású legyen (pH=7)?
- Mekkora tömegű ötvözet oldásával lehet előállítani a semlegesítéshez szükséges mennyiségű savoldatot?



Megoldás:

- a) $\text{Ag} + 2\text{HNO}_3 = \text{AgNO}_3 + \text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
 $\text{Ag}^+ + \text{Cl}^- = \text{AgCl}$
- b) $m(\text{AgCl}) = 0,783 \text{ g}$ és $M(\text{AgCl}) = 143,32 \text{ g/mol}$ tehát $n(\text{AgCl}) = 0,00546 \text{ mol}$
 $n(\text{Ag}) = 0,00546 \text{ mol}$ és $M(\text{Ag}) = 107,87 \text{ g/mol}$ tehát $m(\text{Ag}) = 0,589 \text{ g}$
Mivel $m(\text{ötvözet}) = 1,01 \text{ g}$ ezért $m(\text{Au}) = 0,421 \text{ g}$ tehát $w(\text{Au}) = 0,417$.

Mivel egy karát 4,167 m/m % aranytartalomnak felel meg, így az összetétel:

$$\frac{41,7\%}{4,167\%} = 10,0 \text{ karát}$$

- c) $\text{AgCl} + 2\text{NH}_3 = [\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+ + \text{Cl}^-$
- d) $m(\text{minta}) = 1,03 \text{ g}$, $m(\text{Au}) = 0,429 \text{ g}$ és $m(\text{Ag}) = 0,601 \text{ g}$ tehát $n(\text{Ag}) = 0,0056 \text{ mol}$

A semlegesítést követően 15 ml nátrium-nitrát oldatunk volt, szilárd fázissal az alján.

$$c(\text{HCl}) = 1 \text{ mol/dm}^3 \text{ és } n(\text{HCl}) = 0,01 \text{ mol}$$

$$V(\text{NH}_3) = 18 \text{ cm}^3 = 0,018 \text{ dm}^3 \text{ és } c(\text{NH}_3) = 2 \text{ mol/dm}^3 \text{ tehát } n(\text{NH}_3 \text{ kiindulási}) = 0,036 \text{ mol}$$

$$n(\text{NH}_3 \text{ komplex}) = 2 \cdot n(\text{Ag}) = 2 \cdot 0,0056 \text{ mol} \approx 0,0111 \text{ mol}$$

$$n(\text{NH}_3 \text{ szabad}) = 0,036 - 0,0111 = 0,0249 \text{ mol}$$

$$n(\text{NH}_4\text{Cl}) = n(\text{HCl}) = 0,01 \text{ mol ezért } n(\text{NH}_3 \text{ maradék}) = 0,0249 - 0,01 = 0,0149 \text{ mol}$$

A sav és lúg hozzáadása után puffer rendszert kapunk, melyet ammónia (gyenge bázis), és ammónium-klorid (gyenge bázis erős savval alkotott sója) alkot.

$$K_b = 7,762 \cdot 10^{-6}$$

$$c(\text{OH}^-) = K_b \cdot \frac{n_{\text{bázis}}}{n_{\text{só}}} = 7,762 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{0,0149}{0,01} = 1,153 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$$

$$\text{pOH} = -\log[\text{OH}^-] = 4,94 \text{ tehát } \text{pH} = 14 - \text{pOH} = 9,06$$

Megjegyzés: amennyiben a számolást nem a függvénytáblázatban található adattal végezzük, hanem az $1,8 \cdot 10^{-5}$ bázisállandóval, úgy a végeredmény 9,43-as pH.

- e) $n(\text{Ag}) = n(\text{NO}_2) = 0,00557 \text{ mol}$
 $n(\text{H}^+) = 0,00557 \text{ mol}$ és $\text{pH} = 0,602$ (azaz $c(\text{H}^+) = 0,250 \text{ mol/dm}^3$)
Ezek alapján $V(\text{H}_2\text{O}) = 0,0223 \text{ dm}^3 = 22,3 \text{ cm}^3$



- f) Mivel a tiszta ammónium-klorid oldat savas kémhatású, így biztosra vehető, hogy lesz még mellette ammónia, hogy a pH 7-es legyen, tehát továbbra is puffer rendszerre végzünk számításokat.

Jelölje x a hozzáadott hidrogén-ionok anyagmennyiségét! Ekkor a szabadon maradt ammónia egy része sóvá alakul, így a korábban alkalmazott képletben a bázis (a számláló) x -szel csökken, míg a só (a nevező) x -szel nő.

$$\text{pH} = \text{pOH} = 7,00 \text{ azaz } [\text{OH}^-] = 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$$

$$K_b = 7,762 \cdot 10^{-6}$$

$$c(\text{OH}^-) = K_b \cdot \frac{n_{\text{bázis}} - x}{n_{\text{só}} + x}$$

$$10^{-7} = 7,762 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{0,0149 - x}{0,01 + x}$$

$$x = 0,0145 \text{ mol} = n(\text{H}^+)_{\text{hozzáadott}}$$

$$c(\text{H}^+)_{\text{hozzáadott}} = 10^{-0,602} = 0,250 \text{ mol/dm}^3$$

$$V(\text{sav hozzáadott}) = \frac{0,0145 \text{ mol}}{0,250 \text{ mol/dm}^3} = 0,0582 \text{ dm}^3 = 58,2 \text{ cm}^3$$

A d) feladatrészhöz hasonlóan, az $1,8 \cdot 10^{-5}$ -ös bázisállandóval számolva $58,9 \text{ cm}^3$ lesz a kapott érték.

- g) $n(\text{H}^+) = 0,0145 \text{ mol}$ ezért $n(\text{Ag}) = 0,0145 \text{ mol}$ tehát $m(\text{Ag}) = 1,569 \text{ g}$

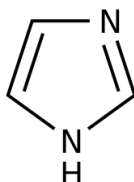
$$m(\text{ötvezet}) = \frac{1,569}{1 - 0,417} = 2,69 \text{ g}$$

A másik bázisállandóval számolva a végeredmény $2,72 \text{ g}$.



5. feladat

Az alábbi feladatban egy egészen különleges heterociklusos vegyülettel, az imidazzal foglalkozunk.



Tautomériája során az imidazol az 1-es nitrogénatomon lévő hidrogént proton formában leadja, majd a 3-as nitrogénatom egy protont felvesz. A két folyamat fordított sorrendben is megtörténhet.

- Írjátok fel az említett egyensúlyi reakciókat!
- Egy kísérletben keletkezett 4-metil-imidazol és 5-metil-imidazol nem tudtuk szétválasztani. Mi voltunk ügyetlenek, vagy tényleg nem lehet? Miért?
- Milyen sav-bázis tulajdonsága lehet az imidazolnak? Milyen másodrendű kötéseket alakíthat ki saját halmazában az imidazol? Milyen halmazállapotot vártok tőle szobahőmérsékleten?

A hisztidin egy esszenciális α -aminosav, melyet úgy származtatunk, hogy az L-alanin (L- α -aminopropánsav) egy hidrogénjét szubsztituáljuk egy imidazolra. A β szénatom az imidazol 4-es szénatomával kapcsolódik.

- Rajzoljátok fel a hisztidin képletét!
- Mit jelent az, hogy esszenciális aminosav?

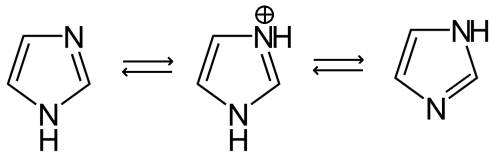
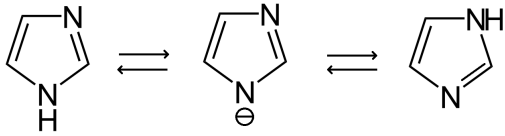
A hisztidin a hisztamin prekuzora a szervezetben, vagyis a hisztamint hisztidinből, annak dekarboxilezésével állítja elő például egy hízósejt hisztidin dekarboxiláz enzime. A hisztamin fontos szerepet tölt be az immunválaszban, például allergiás reakció esetén.

- Írjátok fel a reakciót képletekkel!

A tautomeria egy másik típusa az oxo-enol tautomeria. Az átalakulás során lényegében az oxocsoport hidroxilcsoporttá alakul, miközben létrejön egy szén-szén π -kötés, a folyamat szintén reverzibilis.

- Rajzoljátok fel a piroszőlősav oxo és enol tautomerének képletét! Melyik tautomer lehet a stabilabb?
- Mely vegyületek enol tautomere a propén-2-ol és a vinil-alkohol? Milyen folyamat során állíthatunk elő belőlük telített alkoholokat?
- Mely, szerves makromolekulákban gyakori kötésre lehet még jellemző tautomer átalakulás? Rajzoljátok fel a két alakot!

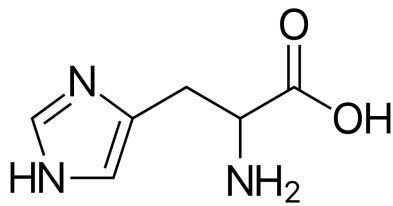
Megoldás:



a)

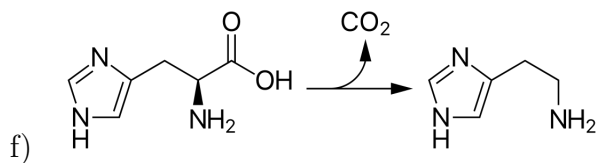
b) A kettőt nem lehet szétválasztani, mivel ugyanaz a vegyület.

c) Amfoter, hidrogénkötés, szilárd.



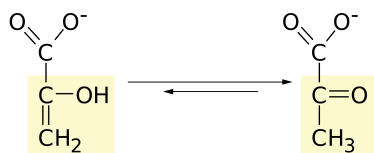
d)

e) A szerkezet egyáltalán nem, vagy csak elégtelen mennyiségben képes előállítani.

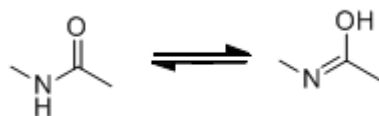


f)

g) Az oxo forma a stabilabb.



h) A propén-2-ol oxo-formája az aceton; a vinil-alkoholé pedig az acetaldehid. Hidrogénaddíció útján állíthatók elő belőlük telített alkoholok.



i) Peptid kötés:

A feladatok során 4 értékes jeggyel számoljatok! A szükséges adatok a függvénytáblázatban megtalálhatóak! Mindegyik feladat részletesen indokolt megoldása 8 pontot ér. A feladatok megoldásához függvénytáblázat, számológép és íróeszközök használhatóak. Sikeres versenyzést kívánunk!