



1. feladat

Anna tevét tart háziállatként. Utánaolvasott, hogy a tehéntej-fehérje fogyasztása során allergiás tüneteket produkáló gyermekek a tevetetejt többnyire gond nélkül fogyaszthatják, és hogy a friss- és a fermentált tevetetej vérnyomás- és koleszterinszint-csökkentő hatással, valamint vírusellenes tulajdonságokkal is rendelkezik. Ezek után Anna a tevetetejének a fehérjetartalmára lett kíváncsi, így meg szeretné vizsgáltatni Kjeldahl módszerével.

A tevetetej átlagos sűrűsége $1,029 \text{ g/cm}^3$.

A Kjeldahl módszer egy szabványos fehérje-meghatározási eljárás, mely a legkülönbébb szerves minták analízisére alkalmas a nyersanyagoktól kezdve a feldolgozott termékekig. Az eljárás három fő műveletből áll: (1) a szerves anyag roncsolása tömény kénsavval, (2) az ammónia felszabadítása és elnyelése sósavban, (3) ammónia mennyiségének meghatározása titrálással.

A fehérjetartalmú mintát forrásban lévő kénsavban 1-2 órán keresztül főzzük forráspontnövelő só és az oxidációs reakció sebességét növelő katalizátor jelenlétében. Az oxidáció során vízelvonas és szenesedés következtében a minta szerves anyagainak C-, H- és O-tartalma szén-dioxidra és vízre bomlik, miközben szerves N-tartalmuk ammónium-hidrogén-szulfáttá és ammónium-szulfáttá alakul át. Emellett kén-dioxid is keletkezik. A roncsolás befejezését az oldat elszíntelenedése és kitisztulása jelzi. A roncsolás végeztével az erősen savas oldat tehát szulfát formájában tartalmazza a minta nitrogéntartalmát, amelyet sójából fel kell szabadítani.

a) Hogyan szabadítanak fel az ammóniát sójából?

A felszabadult, illékony ammóniát vízgőzdesztillációval hajtják ki az oldatból és a desztillátumot ismert koncentrációjú sósav fogadóoldatban fogják fel. A minta ammónia-tartalma ammónium-klorid formájába kerül, az el nem reagált sav mennyiségét pedig ismert koncentrációjú nátrium-hidroxid oldattal titrálják meg.

b) Írjátok fel a titrálás egyenletét!

Az össznitrogén-tartalomból a fehérjetartalom az úgynevezett Kjeldahl-faktorral történő szorzással számítható: $F(\%) = N(\%) \cdot F$, ahol $F(\%)$ a minta tömegszázalékos fehérjetartalma, $N(\%)$ a minta tömegszázalékos nitrogéntartalma és F a Kjeldahl-faktor. A természetes fehérjék nitrogéntartalma 15-17 tömegszázalék, így a fehérjetartalom közelítő értéke is számítható. (16 tömegszázalékos átlagos N-tartalomból induljunk ki!)

c) Mennyi lehet az általános Kjeldahl-faktor?

Egy-egy pohárnyi (2,0 dl) tevetetej mintából indulunk ki. A keletkező ammóniagázt $1,00 \text{ dm}^3$ $0,10 \text{ mol/dm}^3$ -es sósav oldatba vezetjük, amit 1 mol/dm^3 -es $f = 0,960$ faktorú nátrium-hidroxid oldattal titrálunk vissza. Az átlagos NaOH-fogyás $22,49 \text{ cm}^3$.

d) Mennyi a tevetetej mintánk fehérjetartalma (g fehérje/100ml)?

e) Mennyi a tevetetej mintánk tömegszázalékos fehérjetartalma?



1. feladat megoldás

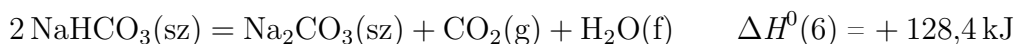
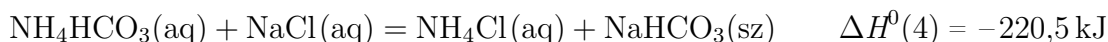
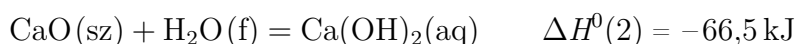
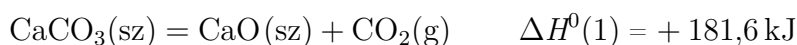
- a) Erősebb bázissal, pl. NaOH-dal.
- b) $\text{NaOH} + \text{HCl} = \text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$
- c) $F = 6,25$
- d) A b) egyenlet alapján kiszámoljuk az ammóniával el nem reagált HCl anyagmennyiségét, ami megegyezik az elfogyott NaOH anyagmennyiségével: $n(\text{HCl}) = n(\text{NaOH}) = c \cdot V \cdot f = 0,0216 \text{ mol}$. Tudjuk, hogy az ammónia elnyeletése előtt 0,1 mol HCl volt jelen a rendszerben és a HCl ammóniával 1:1 arányban reagált ($\text{NH}_3 + \text{HCl} = \text{NH}_4\text{Cl}$), tehát az ammónia anyagmennyisége: $n(\text{NH}_3) = 0,1 - 0,0216 = 0,0784 \text{ mol}$. Ez $0,0784 \text{ mol} \cdot 14 \text{ g/mol} = 1,098 \text{ g}$ fehérje eredetű nitrogént jelent. A természetes fehérjék nitrogéntartalma átlagosan 16 tömegszázalék, tehát $1,098 \text{ g} \cdot 6,25 = 6,861 \text{ g}$ fehérje lesz a mintánkban. Ez 100 ml-re vetítve 3,430 g fehérjét jelent.
- e) 200 ml tej tömege a megadott sűrűség alapján 205,8 g. A tömegszázalékos fehérjetartalom ez alapján $6,861 / 205,8 = 3,33$ tömegszázalék.



2. feladat

A Solvay-féle eljárást a mai napig alkalmazzuk, mivel természetben is nagy mennyiségben megtalálható nyersanyagokat használ, és a lejátszódó reakciók termékeinek nagyja újra felhasználhatóak a gyártás egy másik pontján, így a melléktermékek száma minimálisra redukálható.

Lentebb a gyártás során végbemenő reakciók termokémiai egyenletei találhatók.



- Melyek az eljárás alapanyagai?
- Mi(k) az eljárás mellékterméke(i)?
- Hogyan különül el a fő- a mellékterméktől? Mi ennek a különbségnek a magyarázata?

A fenti egyenletek alapján felírható az eljárás bruttó egyenlete, melyben csak a alapanyagokat és a fő-, illetve melléktermékeket tüntetjük fel, melyek nem visszaforgathatóak a folyamat egyéb szakaszaiba.

- Mi a szódagyártás bruttó termokémiai egyenlete?
- Mennyi a bruttó egyenlethez tartozó reakcióhő? A megadott egyenletek alapján számoljatok!

A szóda számos felhasználásnak örvend, talán egyik legjelentősebb felhasználása a háztartásban használt vizekhez köthető.

- Hogyan nevezzük ezt az felhasználást? Szemléltessétek egyenlettel!

Emellett számos helyen használható marónátron helyettesítésére vizes oldatuk hasonló tulajdonsága miatt.

- Mi ez a tulajdonság? A szóda esetén szemléltessétek egyenlettel!

A szóda 320 °C alatt 10 kristályvízzel kristályosodik.

- Mennyi kristályt kapunk, ha 300 g 20 m/m%-os oldatot 100 °C-ról 20 °C-ra hűtünk? 100 g víz 21,5 g vízmentes szódát old 20 °C-on.



2. feladat megoldás

- a) $\text{CaCO}_3, \text{NaCl}$
- b) CaCl_2
- c) Különböző halmazállapotban vannak, ugyanis a szódabikarbónának sokkal kisebb az oldhatósága.
- d) $\text{CaCO}_3(\text{sz}) + 2 \text{NaCl}(\text{aq}) = \text{Na}_2\text{CO}_3(\text{sz}) + \text{CaCl}(\text{aq})$
- e) $-279,9 \text{ kJ}$, (az (1) + (2) + $2 \cdot$ (3) + $2 \cdot$ (4) + (5) + (6) egyenletekhez tartozó reakcióhők összege)
- f) vízlágyítás, $\text{Ca}^{2+} + \text{Na}_2\text{CO}_3 = \text{CaCO}_3 + 2 \text{Na}^+$
- g) lúgos kémhatású, $\text{Na}_2\text{CO}_3 + \text{H}_2\text{O} = 2 \text{Na}^+ + \text{HCO}_3^- + \text{OH}^-$
- h) $100 \text{ }^\circ\text{C}$ -on 300 g oldat $20 \text{ m/m}\%$, azaz 60 g szódát és 240 g vizet tartalmaz. $20 \text{ }^\circ\text{C}$ -on két fázis lesz jelen: (1) a kristály ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$), tömegét jelöljük x -el, a $\text{Na}_2\text{CO}_3 \text{ m/m}\%$ -os aránya a kristályban $37,06\%$, és (2) a telített, $17,7 \text{ m/m}\%$ -os oldat, tömegét jelölje y . Felírható az alábbi kétismeretlenes egyenletrendszer (a tömeg nem változik):

$$x + y = 300$$

$$0,371x + 0,177y = 60$$

y -t x -szel kifejezve, a második egyenletbe behelyettesítve azt egy egyismeretlenes egyenletet kapunk: $0,371x + 0,177(300 - x) = 60$, melynek megoldása $x = 35,57$, tehát a kristály tömege $35,57 \text{ g}$ lesz.



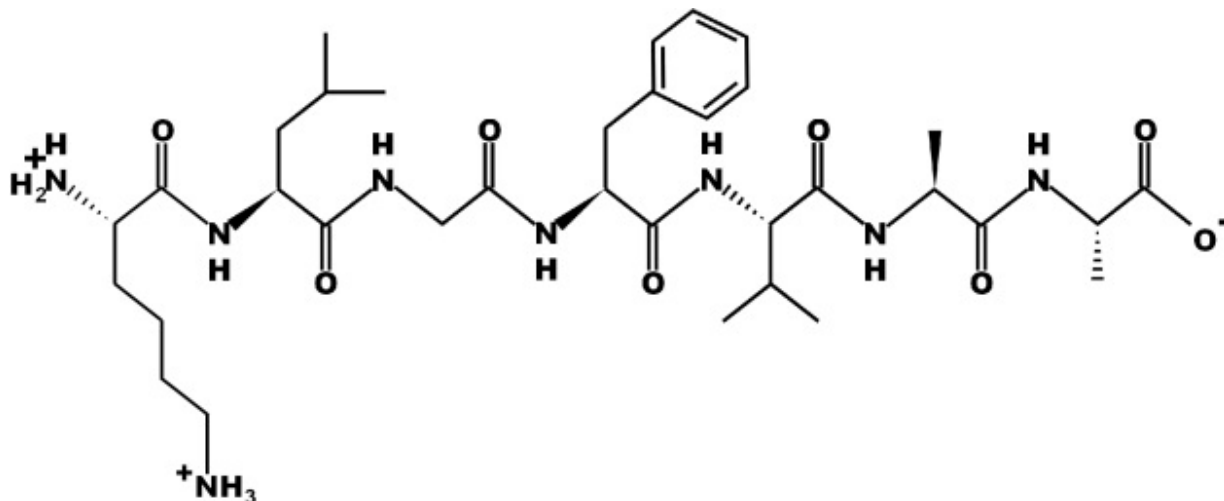
3. feladat

Dani peptidkémiaiával foglalkozik és jelenleg a KLGFVAA peptidet kutatja. Sürgető a dolga, jövő héten előadást tart és még temérdek mérés áll előtte, aminek a számításait sajnos otthon felejtette, ezért a ti segítségeteket kéri:

- Hogy könnyebben tájékozódjatok, rajzoljátok le a peptidet alkotó aminosavakat, valamint röviden jellemezzétek az oldalláncokat (poláros/apoláros, bázikus/savas/semleges)
- Dani a peptidet vizes közegben szeretné feloldani úgy, hogy a pH megközelítőleg 7,5 legyen, ezáltal meghatározva a peptid össztöltését. Javasoljatok számára egy puffert, megnevezve annak komponenseit és azok mennyiségét, ha tudjátok, hogy 200 ml 0,20 mol/dm³-es oldatot szeretne belőle készíteni! (A 0,20 mol/dm³ a puffer készítésekor oldott anyagokra vonatkozik.) Indoklásotok legyen a számolás menete!
- A peptidmolekula eredő töltését ezen a pH-n csupán az oldalcsoport(ok) határozza(-ák) meg, mivel mindkét terminális (N és C) töltéssel rendelkezik (-NH₃⁺ és -COO⁻). Mekkora a peptid össztöltése a pufferben?



3. feladat megoldás



- a) lizin: aminobutil (bután-amin) oldallánc, bázikus poláros
 leucin: izobutil oldallánc, semleges apoláros
 glicin: oldallánc nélküli, semleges
 valin: izopropil oldallánc, semleges apoláros
 fenilalanin: benzil oldallánc, semleges apoláros aromás
 alanin: metil oldallánc, semleges apoláros
- b) Bármilyen helyes megfejtés elfogadható.
- c) Az izoelektromos pont 9,47. $\text{pH} = 7,5$ esetén, mivel a lizin bázikus, egy oldallánc feltételesen protonált, az össztöltés +1 lesz.

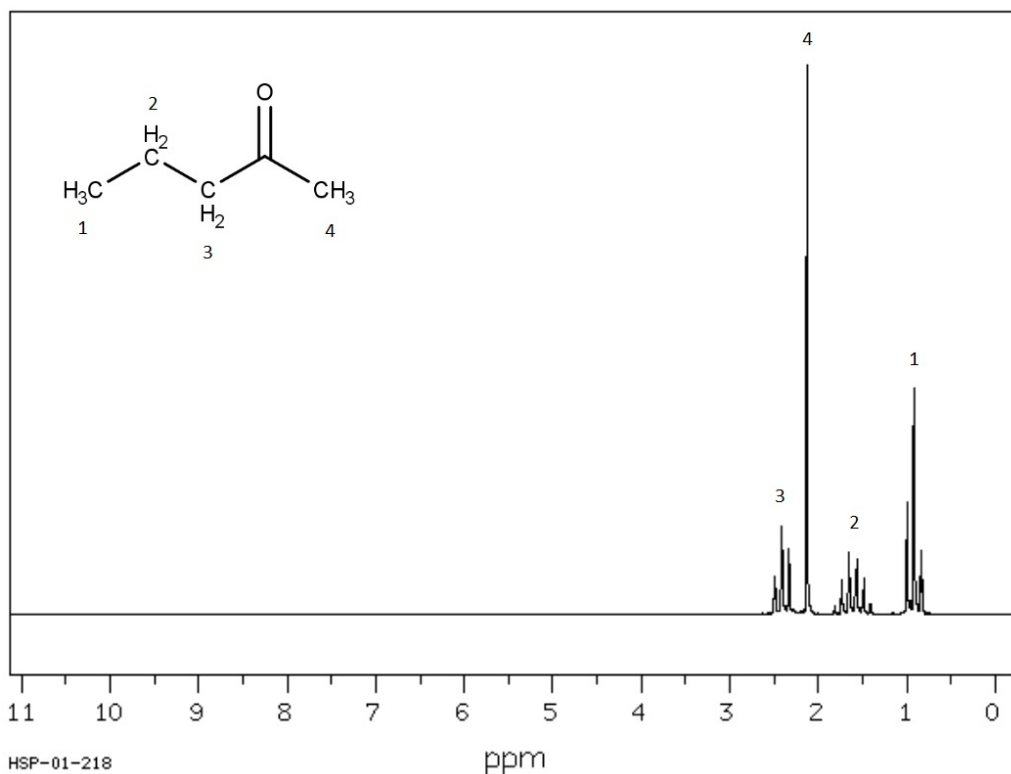


4. feladat

A preparatív szerves kémiai munka sarkalatos pontja a keletkezett termék azonosítása, azaz meggyőződni arról, rendben végbement-e a reakció és a kívánt termékünk keletkezett-e. Az NMR (mágneses magrezonancia) spektroszkópia kiválóan alkalmazható erre. E módszer során erős mágneses térbe helyezett 0-tól eltérő magspinű nukleuszokat vizsgálhatunk. Őket egy bizonyos frekvenciájú elektromágneses jellel „kibillenthetjük” állapotukból a mágneses térben. Ezek „visszabilenése” - relaxációja – mérhető sugárzás mellett történik. Kérdezhetnénk – hogyan lesznek ebből különböző jelek? Az atommagokat ugyebár elektronok veszik körbe, melyek valamelyest árnyékolják az erős mágneses teret. Így különböző szomszédsággal rendelkező (ún. kémiai környezetű) atommagok más kémiai eltolódással rendelkeznek majd, vagyis a hidrogének jelei az x-tengelyen máshol találhatóak.

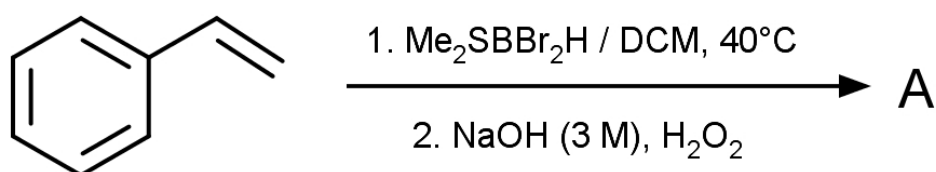
Proton NMR esetén hidrogén atommagokat mérhetünk. Ha ránézünk egy ¹H-NMR spektrumra, azt látjuk, hogy bizonyos jelek felhasadtak, így többszörös csúcsok is megjelennek. Ezt a szomszédos (és más kémiai környezetű) atomokon lévő hidrogének kölcsönhatása okozza. Egy hidrogén jele *n* szomszédos hidrogén atommag esetén *n*+1 csúcsra hasad.

Példánk legyen a pentán-2-on spektruma:

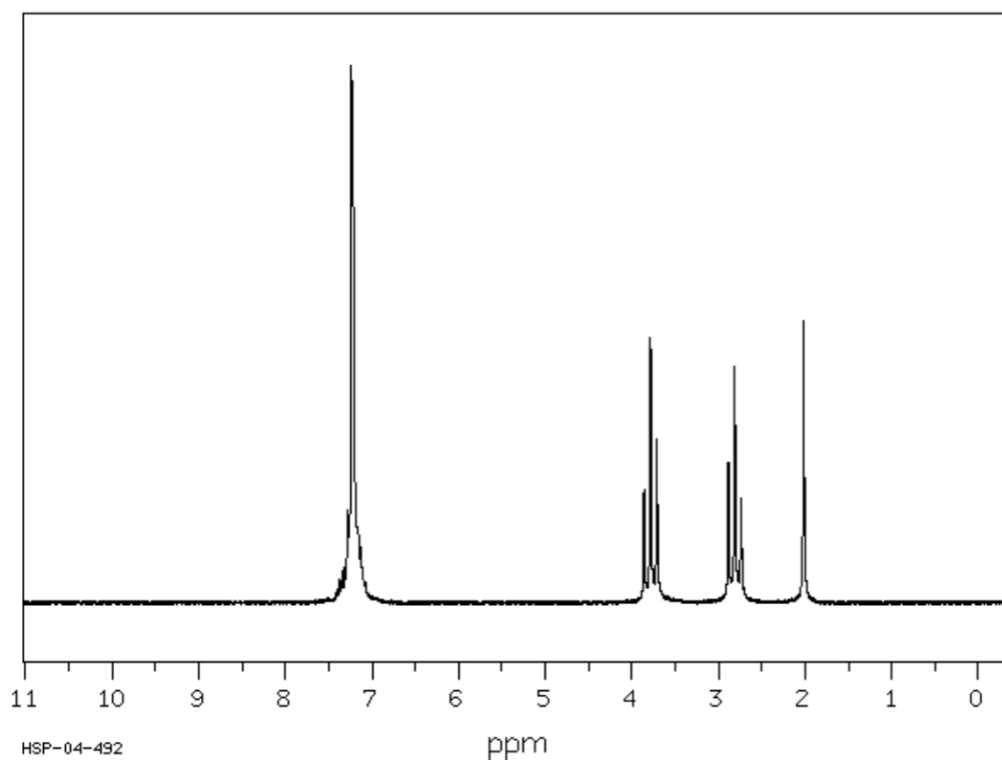


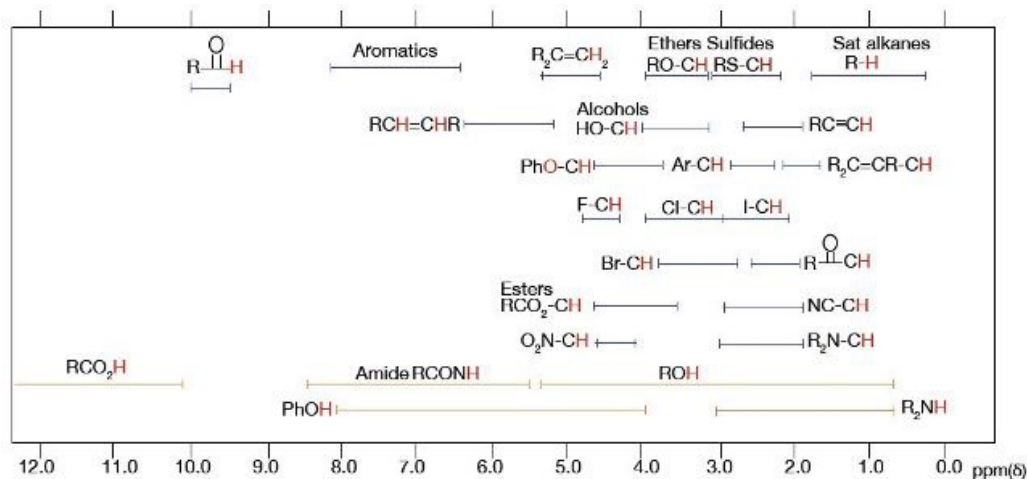


A Dürer szervezők áomlaborjában, ahol minden kívánt eszköz megtalálható, a fülke mindig tiszta és minden folyamat tökéletesen végbemegy, a következő (víz)addíciós reakciót végezték el a feladat készítői:



A keletkezett termékből NMR-mintát vettek, elvégezték a mérést és a következő spektrumot kapták:



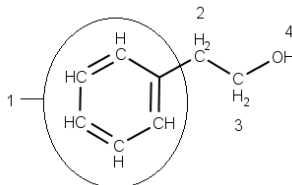


- A spektrum alapján határozzátok meg a keletkezett terméket az eltolódástáblázat segítségével, asszignálva az összes jelet (azaz jelöljétek be, hogy az adott csúcs melyik protonokhoz tartozik)! Miben tér el a tapasztalat a középiskolában tanultaktól?
- Mennyi kiindulási anyagra van szükség, ha 10,00 g terméket szeretnénk előállítani, és a várható termelés 89%?
- Hány g boránra (Me₂SBBr₂H) van szükségünk, ha tudjuk, hogy a kiindulási anyaghoz képest 1,2-szeres moláris mennyiség kell a reakcióhoz?
- Mennyi diklórmétánban (DCM) oldjuk a reakcióelegyet, hogy a kiindulási anyag koncentrációja 0,2 mol/dm³ legyen?
- Hány gramm NaOH-ot kell kimérnünk, hogy a termékhez képest négyszeres moláris mennyiségben vehessen részt a reakcióban?

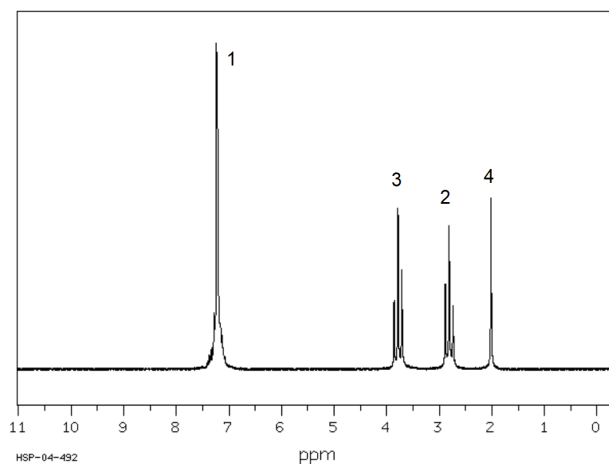


4. feladat megoldás

a) A keletkezett termék: Nem követi a Markovnyikov-szabályt!



A hozzá tartozó spektrum:



- b) A termék móltömege 122 g/mol, így 10,00 g 0,08197 mol. 89% termelés esetén 0,09210 mol kiindulási anyag kell, mely móltömege 104 g/mol, tehát a tömege 9,58 g lesz.
- c) A kiindulási anyagmennyiség (a b) feladat alapján) 0,09210 mol, ennek 1,2-szerese kell, azaz 0,1105 mol. A borán móltömege 233,8 g/mol, így a szükséges tömeg 25,84 g.
- d) A kiindulási anyag anyagmennyisége (a b) feladat alapján) 0,09210 mol, a koncentráció 0,2 mol/dm³, így a szükséges térfogat 460,5 cm³ lesz, feltételezve, hogy a térfogat csupán diklórmetánból származik.
- e) A termék anyagmennyisége (a b) feladat alapján) 0,08197 mol, ennek négyszerese lesz a hidroxid anyagmennyisége, ami 0,3279 mol, a móltömege 40 g/mol, tehát a tömege 13,12 g lesz.



5. feladat

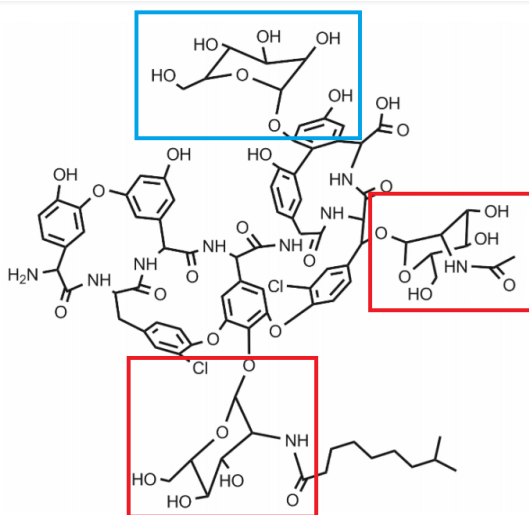
A mellékelt cikk a folyadékkromatográfiás enantiomerszétválasztást mutatja be. Olvassátok el és válaszoljatok a következő kérdésekre a cikk alapján!

- I) Definiáljátok a királis molekula fogalmát!
- II) Az emberi szervezetben melyik enantiomer fordul elő monoszacharidokból és melyik α -aminosavakból?
- III) Miért lehet különbség az enantiomerek biológiai hatása között, ha kémiai tulajdonságaik megegyeznek?
- IV) Határozzátok meg a racém elegy fogalmát!
- V) Mit jelent a királis tisztaság fogalma, és milyen esetekben van ennek nagy jelentősége?
- VI) Foglaljátok össze néhány mondatban a folyadékkromatográfiás módszer lényegét és előnyeit a királis molekulák szétválasztásában!
- VII) A 2. ábrán szereplő példában a (+) vagy a (-) enantiomer kötődik erősebben az állófázis-hoz?
- VIII) Jelöljétek be a teikoplanin (4. ábra bal oldali vegyület) szerkezeti képletén a két D-glükózamint és a D-mannózt!
- IX) Miért befolyásolja a mozgó fázis pH-ja a Chirobiotic TAG oszlop használhatóságát?
- X) Mondjatok példát, hogy hogyan lehet egy szelektor hidrofób jellegét növelni!
- XI) Írjátok le saját szavaitokkal a HILIC hatást!
- XII) Mi a magyarázata, hogy aromás oldalláncú aminosavak esetén a retenciós faktor értékei minimum jellegű görbét írtak le?
- XIII) Miért okoz nagyobb különbséget a retenciós időben az elágazó alkillánc, mint a hosszabb alkillánc?
- XIV) Előfordul az emberi szervezetben endogén γ -aminosav? Ha igen, mi a szerepe?
- XV) Írjatok egy példát arra, hogy milyen (MRSA okozta) fertőzőes betegségben adunk intravénás vankomicint!



5. feladat megoldás

- I) Olyan molekula, amely tükörképi párjával nem hozható fedésbe./Olyan molekula, amelynek van kiralitáscentruma/királis szénatomja./Optikailag aktív molekula, melynek izomerjei a polarizált fény síkját ellenkező irányba forgatják.
- II) Az emberi szervezetben monoszacharidok esetén D, α -aminosavak esetén L enantiomer fordul elő.
- III) Az élő szervezetekben királis molekulák királis molekulákkal lépnek kölcsönhatásba, és ezen kölcsönhatás jellemzi a biológiai hatást.
- IV) Az enantiomerek 1:1 arányú keveréke.
- V) Azt jelenti, hány százalékban tartalmazza a minta a másik enantiomert. Kiemelt jelentőségű, ha a másik enantiomernek negatív, nem kívánt biológiai hatása van.
- VI) A kromatográfia többkomponensű rendszerek szétválasztására szolgál. A komponensek a mozgó és az álló fázis között oszlanak meg folyamatos áramlás mellett. A kialakuló különböző kölcsönhatások miatt sebességkülönbség jön létre közöttük és így szétválnak, elkülöníthetőek. Királis molekulák esetén a kiralitásból fakadó eltérő kötődés más királis anyagokhoz az elválasztás alapja. Előnyei: nem igényel hosszadalmas és bonyolult minta előkészítést, az analízis után a vegyületek eredeti formájukban állnak rendelkezésünkre.
- VII) A (+) enantiomer kötődik erősebben.



VIII)

- IX) Mert a töltési viszonyokat, ezáltal az álló és mozgó fázis között kialakuló kölcsönhatást módosítja.



- X) Például szénhidrogénlác hozzáadásával.
- XI) Ha az eluens apolárisabb, a poláris jellegű aminosavak kevésbé vannak oldatban, jobban kötődnek az állófázishoz.
- XII) A minimum pont előtti csökkenő szakasz abból adódik, hogy az aromás gyűrű az amúgy poláris aminosavaknak apoláris jelleget kölcsönöz. A vízben gazdagabb eluens esetén így előtérbe kerülnek a hidrofób-hidrofób kölcsönhatások, melyek nagyobb víztartalom mellett nagyobb visszatartást eredményeznek. A hidrofób-hidrofób, illetve a HILIC hatások eredője eredményezi a görbék változó alakját, ez befolyásolja a görbe minimumának helyét, valamint a minimumpont előtti csökkenés, illetve az utána lévő emelkedés meredekségét.
- XIII) Az elágazó szénlác kedvezőtlenül hat a molekula-királis állófázis komplex kialakulására, ami kisebb retenciós faktort eredményez.
- XIV) Igen, a GABA, ami egy neurotranszmitter.
- XV) MRSA okozta endocarditis (szívbelhártyagyulladás), meningitis (agyhártyagyulladás), sepsis (véráramfertőzést követő életveszélyes állapot) és bőr/lágyrészfertőzések esetén adunk intravénást vankomicint.

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