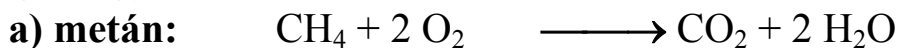


36. Kémiai Diákolimpia

A feladatok (megjelentek a 2004/5 számban) megoldásai

1.1 Az égési egyenletek:



A termodinamikai adatok:

Metán:

$$\Delta H^0 = [2 \cdot (-241,8) - 393,5 - (-74,6)] \text{ kJ mol}^{-1} = -802,5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta S^0 = [2 \cdot (188,8) + 213,8 - 186,3 - 2 \cdot 205,2] \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} = -5,3 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$\Delta G^0 = -802,5 \text{ kJ mol}^{-1} - 298,15 \text{ K} \cdot (-5,3 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) = -800,9 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Etán:

$$\Delta H^0 = [6 \cdot (-241,8) - 4 \cdot 393,5 - 2 \cdot (-84,0)] \text{ kJ mol}^{-1} = -2856,8 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta S^0 = [6 \cdot 188,8 + 4 \cdot 213,8 - 2 \cdot 229,2 - 7 \cdot 205,2] \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} = +93,2 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$\Delta G^0 = -2856,8 \text{ kJ mol}^{-1} - 298,15 \text{ K} \cdot (93,2 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) = -2884,6 \text{ kJ mol}^{-1}$$

1.2 a) A metán és etán 1 m³ földgázban:

$$m = \rho \cdot V = 0,740 \text{ g l}^{-1} \cdot 1000 \text{ l} = 740 \text{ g}$$

$$\begin{aligned} M_{\text{átl}} &= \sum_i x(i)M(i) = 0,0024 \cdot 44,01 \text{ g mol}^{-1} + 0,0134 \cdot 28,02 \text{ g mol}^{-1} + \\ &\quad + 0,9732 \cdot 16,05 \text{ g mol}^{-1} + 0,011 \cdot 30,08 \text{ g mol}^{-1} = \\ &= 16,43 \text{ g mol}^{-1} \end{aligned}$$

$$n_{\text{össz}} = m (M_{\text{átl}})^{-1} = 740 \text{ g} \cdot (16,43 \text{ g/mol})^{-1} = 45,04 \text{ mol}$$

$$n(i) = x(i) \cdot n_{\text{össz}}$$

$$n(\text{CH}_4) = x(\text{CH}_4) \cdot n_{\text{össz}} = 0,9732 \cdot 45,04 \text{ mol} = 43,83 \text{ mol}$$

$$n(\text{C}_2\text{H}_6) = x(\text{C}_2\text{H}_6) \cdot n_{\text{össz}} = 0,0110 \cdot 45,04 \text{ mol} = 0,495 \text{ mol}$$

1.2 b) A felszabaduló hő:

$$\begin{aligned} E_{\text{égés}} &= \sum_i n(i) \Delta_c H^0(i) = 43,83 \text{ mol} \cdot (-802,5 \text{ kJ mol}^{-1}) + \\ &\quad + 0,495 \text{ mol} \cdot 0,5 \cdot (-2856,8 \text{ kJ mol}^{-1}) = -35881 \text{ kJ} \end{aligned}$$

Eltérés a szolgáltató adataitól

$$E_{\text{szolg}} = 9,981 \text{ kWh m}^{-3} \cdot 1 \text{ m}^3 \cdot 3600 \text{ kJ (kWh)}^{-1} = 35932 \text{ kJ}$$

$$\text{eltérés} = (E_{\text{égés}} - E_{\text{szolg}}) \cdot 100\% \cdot (E_{\text{égés}})^{-1} =$$

$$= (35881 \text{ kJ} - 35932 \text{ kJ}) \cdot 100\% \cdot (35881 \text{ kJ})^{-1} = -0,14\%$$

1.3 A víz melegítésére fordított energia:

$$n_{\text{víz}} = V_{\text{víz}} \rho_{\text{víz}} (M_{\text{víz}})^{-1} = 22,5 \text{ m}^3 \cdot 10^6 \text{ g m}^{-3} \cdot (18,02 \text{ g mol}^{-1})^{-1} = 1,249 \cdot 10^6 \text{ mol}$$

$$E_{\text{víz}} = n_{\text{víz}} \cdot C_p \cdot \Delta T = 1,249 \cdot 10^6 \text{ mol} \cdot 75,30 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \cdot 14 \text{ K} = 1316 \text{ MJ}$$

A levegő melegítésére fordított:

$$\text{A ház térfogata: } V = 15 \text{ m} \cdot 8 \text{ m} \cdot 3 \text{ m} + 0,5 \cdot 15 \text{ m} \cdot 8 \text{ m} \cdot 2 \text{ m} = 480 \text{ m}^3$$

$$n_{\text{lev}} = pV \cdot (RT)^{-1} = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Pa} \cdot 480 \text{ m}^3 \cdot (8,314 \text{ J (K mol)}^{-1} \cdot 283,15 \text{ K})^{-1} = 2,065 \cdot 10^4 \text{ mol}$$

$$C_p(\text{lev}) = 0,21 \cdot 29,4 \text{ J (K mol)}^{-1} + 0,79 \cdot 29,1 \text{ J (K mol)}^{-1} = 29,16 \text{ J (K mol)}^{-1}$$

$$E_{\text{lev}} = n_{\text{lev}} \cdot C_p(\text{lev}) \cdot \Delta T = 2,065 \cdot 10^4 \text{ mol} \cdot 29,17 \text{ J (K mol)}^{-1} \cdot 20 \text{ K} = 12,05 \text{ MJ}$$

1.4 A hőmérséklet fenntartásához szükséges energia:

A ház felülete:

$$A_{\text{ház}} = 3 \text{ m} \cdot 46 \text{ m} + 8 \text{ m} \cdot 2 \text{ m} + ((2 \text{ m})^2 + (4 \text{ m})^2)^{1/2} \cdot 2 \cdot 15 \text{ m} = 288,16 \text{ m}^2$$

$$\text{A fal hővezetési tényezője: } \lambda_{\text{fal}} = 1 \text{ J (s K m)}^{-1}$$

A hőmérsékletkülönbség által keltett energiaáram (falvastagság $d = 0,2 \text{ m}$)

$$J = E_{\text{veszt}} (A \cdot \Delta t)^{-1} = \lambda_{\text{fal}} \cdot \Delta T \cdot d^{-1}$$

$$E_{\text{veszt}} = 288,16 \text{ m}^2 \cdot (12 \cdot 60 \cdot 60 \text{ s}) \cdot 1 \text{ J (s K m)}^{-1} \cdot 25 \text{ K} \cdot (0,2 \text{ m})^{-1} = 1556 \text{ MJ}$$

1.5 Összenergia és költségek:

$$E_{\text{össz}} = E_{\text{víz}} + E_{\text{lev}} + E_{\text{veszt}} = 1316 \text{ MJ} + 12 \text{ MJ} + 1556 \text{ MJ} = 2884 \text{ MJ}$$

A szükséges gáz térfogata:

$$V = 2,884 \cdot 10^6 \text{ kJ} \cdot (3600 \text{ s h}^{-1} \cdot 9,981 \text{ kJ s}^{-1} \text{ m}^{-3} \cdot 0,9)^{-1} = 89,18 \text{ m}^3$$

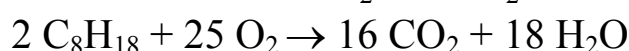
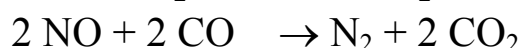
$$\text{Ára: } 0,40 \text{ € m}^{-3} \cdot 89,18 \text{ m}^3 = 35,67 \text{ €}$$

$$\text{Bérleti díj: } 150,00 \text{ €, összköltség} = 185,67 \text{ €}$$

A szükséges elektromosság ára:

$$2,884 \cdot 10^6 \text{ kJ} \cdot 0,137 \text{ €} \cdot (3600 \text{ s h}^{-1} \cdot 1 \text{ kJ s}^{-1} \text{ h})^{-1} = 109,75 \text{ €}$$

$$\text{Bérleti díj: } 100,00 \text{ €, összköltség} = 209,75 \text{ €}$$

2.1 Reakcióegyenletek:**2.2 A λ szondával kapcsolatos állítások:**

- Igaz: Ha a λ -érték az optimális tartományba esik, akkor a szén-monoxid és a szénhidrogének oxidálhatók a háromfunkciós katalitikus konverterben.

- Igaz: Ha $\lambda > 1$, akkor a szén-monoxid és a szénhidrogének oxidálhatók a háromfunkciós katalitikus konverterben.
- Hamis: Ha $\lambda < 0,975$, akkor a nitrogén-oxidok rosszul redukálhatók.

2.3 a) A felület borítottsága:

$$\Theta = \frac{0,85 \text{ kPa}^{-1} \times 0,65 \text{ kPa}}{1 + 0,85 \times 0,65}$$

$$\theta = 0,356 \text{ vagy } 35,6 \%$$

2.3 b) A nyomás, amelyen a felületi borítottság 15 %-os:

$$\theta = \frac{K \cdot p}{1 + K \cdot p} \Leftrightarrow K \cdot p = \theta + \theta \cdot K \cdot p \Leftrightarrow p \cdot (K - \theta \cdot K) = \theta$$

$$p = \frac{\theta}{K - \theta \cdot K} = 0,21 \text{ kPa}$$

2.3 c) A bomlási reakció rendűsége:

kis gáznyomáson: 1

nagy gáznyomáson: 0

$$r = k \cdot \theta = k \cdot \frac{K \cdot p}{1 + K \cdot p}, \quad p \text{ kicsi} \Rightarrow p \ll \frac{1}{K} \Rightarrow r = k \cdot K \cdot p \text{ a rendűség } 1.$$

$$p \text{ nagy} \Rightarrow p \gg \frac{1}{K} \Rightarrow r = k \text{ a rendűség } 0.$$

2.3 d) A $V_{a,\max}$ térfogat és a $K \cdot V_{a,\max}$ szorzat:

$$\frac{1}{\theta} = \frac{1}{K \cdot p} + 1 = \frac{V_{a,\max}}{V_a} \Rightarrow \frac{1}{K \cdot V_{a,\max}} + \frac{p}{V_{a,\max}} = \frac{p}{V_a}$$

$$\text{meredekség: } \frac{1}{V_{a,\max}} = 1,9 \text{ cm}^{-3} \Rightarrow V_{a,\max} = 0,53 \text{ cm}^3$$

$$\text{tengelymetszet: } \frac{1}{K \cdot V_{a,\max}} = 6 \cdot 10^2 \text{ Pa cm}^{-3} \Rightarrow K \cdot V_{a,\max} = 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}^{-1} \text{ cm}^3$$

2.4 A sebességi egyenlet:

A szöveg alapján $r = k_2 \cdot \theta_{\text{CO}_2}$

A mechanizmus első lépésében kialakuló egyensúlyra felírható:

$$\theta_{\text{CO}_2} = \frac{k_1}{k_{-1}} \cdot \theta_{\text{co}} \cdot \theta_{\text{O}_2}^{\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad r = k_2 \cdot \frac{k_1}{k_{-1}} \cdot \theta_{\text{co}} \cdot \theta_{\text{O}_2}^{\frac{1}{2}}$$

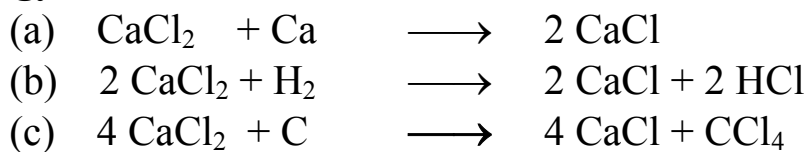
A Langmuir izoterma alapján:

$$\theta_{\text{CO}} = \frac{K_{\text{CO}} \cdot p_{\text{CO}}}{1 + K_{\text{CO}_2} \cdot p_{\text{CO}_2} + K_{\text{CO}} \cdot p_{\text{CO}} + K_{\text{O}_2} \cdot p_{\text{O}_2}}$$

$$\theta_{\text{O}_2} = \frac{K_{\text{O}_2} \cdot p_{\text{O}_2}}{1 + K_{\text{CO}_2} \cdot p_{\text{CO}_2} + K_{\text{CO}} \cdot p_{\text{CO}} + K_{\text{O}_2} \cdot p_{\text{O}_2}}$$

$$r = k_2 \frac{k_1}{k_{-1}} \frac{K_{\text{CO}} \cdot p_{\text{CO}} \cdot (K_{\text{O}_2} \cdot p_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}}}{\left(1 + K_{\text{CO}_2} \cdot p_{\text{CO}_2} + K_{\text{CO}} \cdot p_{\text{CO}} + K_{\text{O}_2} \cdot p_{\text{O}_2}\right)^{\frac{3}{2}}}$$

3.1 Az egyenletek:



3.2 az ezüstös fémszemcsék: Ca
a színtelen kristályok: CaCl₂

Megj: CaCl nem állítható elő Ca és CaCl₂ hagyományos szilárdfázisú reakciójával.

3.3 A tapasztalati képlet:

$$100 \% - (52,36\% + 46,32\%) = 1,32\% \text{ X}$$

A molarányok:

$$\text{Ca: } 52,36 \text{ g} / 40,08 \text{ g mol}^{-1} = 1,31 \text{ mol}$$

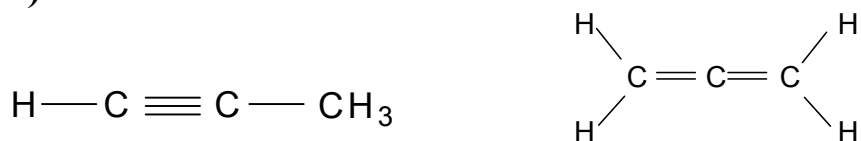
$$\text{Cl: } 46,32 \text{ g} / 35,45 \text{ g mol}^{-1} = 1,31 \text{ mol}$$

X: 1,32 g / M(X) = → X csak hidrogén lehet.

$n(\text{Ca}) : n(\text{Cl}) : n(\text{H}) = 1 : 1 : 1$, **a képlet:** CaClH

Megj.: A CaCl₂ reakciója hidrogénnel nem CaCl- ad, hanem CaClH-t. A kapott vegyület szerkezetét röntgendiffrakcióval állapították meg, ami a hidrogén jelenlétének megállapítására nem jól alkalmazható. Ezért nem észlelték a hidrogént és elég hosszasan CaCl-nek hitték a CaClH-t..

3.4 a) A szerkezetek:



3.4 b) A vegyület összegképlete: $\text{Ca}_3\text{C}_3\text{Cl}_2$

Megj: Az $n(\text{Ca}):n(\text{Cl})$ arány = $1.5 : 1$ [vagy inkább = $3 : 2$, ami felírható, mint $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{Ca}^{2+} = \text{Ca}_3\text{Cl}_2^{4+}$] adott és a terméknek tartalmaznia kell egy C_3^{4-} aniont.

3.5 a) A CaCl várható szerkezete: NaCl típusú, mert:

$$r(\text{Ca}^+)/r(\text{Cl}^-) = 120 \text{ pm}/167 \text{ pm} = 0,719$$

3.5 b) A $\Delta_k H^0(\text{CaCl})$ képződéshő:

A Born-Haber körfolyamat lépéseit összegezve:

$$\begin{aligned} \Delta_k H^0(\text{CaCl}) &= \Delta_{\text{olv}} H^0(\text{Ca}) + \Delta_{\text{pár}} H^0(\text{Ca}) + \Delta_{\text{I. IE}} H(\text{Ca}) + \frac{1}{2} \Delta_{\text{diss}} H(\text{Cl}_2) + \\ &+ \Delta_{\text{EA}} H(\text{Cl}) + \Delta_{\text{rács}} H(\text{CaCl}) = \\ &= (159,3 + 589,7 + 120 - 349,0 - 751,9) \text{ kJ mol}^{-1} = -231,9 \text{ kJ mol}^{-1} \end{aligned}$$

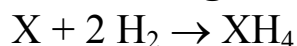
3.6 Stabilitás:

A $2 \text{ CaCl} \rightarrow \text{CaCl}_2 + \text{Ca}$ folyamatra:

$$\Delta G \approx \Delta H = -796,0 \text{ kJ mol}^{-1} + 463,8 \text{ kJ mol}^{-1} = -332,2 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Tehát a CaCl nem stabil.

4.1 X és atomtömege, a vegyületek szerkezete:



$$\text{I) } 5,0 \text{ g} = [n_1(\text{XH}_4) + 2n_2(\text{X}_2\text{H}_6)] \cdot M(\text{X})$$

$$\text{II) } 5,628 \text{ g} = n_1(\text{XH}_4) \cdot [M(\text{X}) + 4 \cdot M(\text{H})] + n_2(\text{X}_2\text{H}_6) \cdot [2M(\text{X}) + 6 \cdot M(\text{H})]$$

$$\text{III) } n_1(\text{XH}_4) = 2n_2(\text{X}_2\text{H}_6)$$

$$\text{III,I) } \rightarrow \text{I') } 2n_1(\text{XH}_4) \cdot M(\text{X}) = 5,0 \text{ g}$$

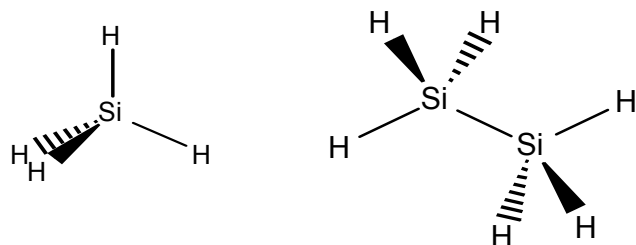
$$\text{III,II) } \rightarrow \text{II') } n_1(\text{XH}_4) \cdot [2M(\text{X}) + 7,07 \text{ g mol}^{-1}] = 5,628 \text{ g}$$

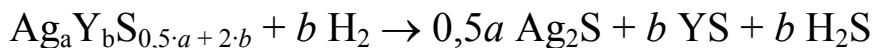
$$\text{I',II') } \rightarrow \text{VI) } (5,0 \text{ g}) \cdot [2M(\text{X})]^{-1} = (5,628 \text{ g}) \cdot [2M(\text{X}) + 7,07 \text{ g mol}^{-1}]^{-1}$$

$$M(\text{X}) = 3,535 \text{ g mol}^{-1} \cdot (5,628 \text{ g})^{-1} \cdot [(5,0 \text{ g})^{-1} - (5,628 \text{ g})^{-1}]^{-1}$$

$$M(\text{X}) = 28,14 \text{ g mol}^{-1} \quad \text{X tehát Si.}$$

A termékek térbeli szerkezete:



4.2 Y és atomtömege, az argirodit tapasztalati képlete:

$$\text{I) } 10 \text{ g} = n(\text{Ag}_a\text{Y}_b\text{S}_{0,5a+2b}) \cdot [a \cdot M(\text{Ag}) + b \cdot M(\text{Y}) + (0,5a + 2b) \cdot M(\text{S})]$$

$$\text{II) } n(\text{H}_2) = \frac{p \cdot V(\text{H}_2)}{RT} = \frac{100 \text{ kPa} \cdot 0,295 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3}{8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \cdot 400 \text{ K}} = 8,871 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

$$n(\text{Ag}_a\text{Y}_b\text{S}_{0,5\cdot a + 2\cdot b}) = b^{-1} \cdot 8,871 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

$$\text{III) } 11,88 = \frac{a \cdot M(\text{Ag})}{b \cdot M(\text{Y})} \quad a \cdot M(\text{Ag}) = 11,88 \cdot b \cdot M(\text{Y})$$

$$\text{II, I) } \rightarrow \text{II'}$$

$$b \cdot 10 \text{ g} \cdot (8,871 \cdot 10^{-3} \text{ mol})^{-1} = a \cdot M(\text{Ag}) + b \cdot M(\text{Y}) + (0,5 \cdot a + 2b) \cdot M(\text{S})$$

$$b \cdot 1127 \text{ g mol}^{-1} = a \cdot M(\text{Ag}) + b \cdot M(\text{Y}) + (0,5 \cdot a + 2b) \cdot M(\text{S})$$

$$\text{III, II' } \rightarrow \text{IV) } b \cdot 1127 \text{ g mol}^{-1} = 11,88 \cdot b \cdot M(\text{Y}) + b \cdot M(\text{Y}) + (0,5 \cdot a + 2b) \cdot M(\text{S})$$

$$b \cdot 1127 \text{ g mol}^{-1} = 12,88 \cdot b \cdot M(\text{Y}) + (0,5 \cdot \frac{11,88 \cdot b \cdot M(\text{Y})}{M(\text{Ag})} + 2b) \cdot M(\text{S})$$

$M(\text{Y}) = 72,57 \text{ g mol}^{-1}$, tehát Y a germánium.

A III egyenletbe visszahelyettesítve $a : b = 8 : 1$.

Az argirodit tapasztalati képlete: Ag_8GeS_6 .

4.3 A C-H kötés erőállandója:

$$k(\text{C-H}) = [2\pi \cdot c \cdot \tilde{\nu}(\text{C-H})]^2 \cdot \frac{1}{N_A} \cdot \frac{3M(\text{C}) \cdot M(\text{H})}{3M(\text{C}) + 4M(\text{H})}$$

$$= [2\pi \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1} \cdot 3030 \text{ cm}^{-1}]^2 \cdot \frac{1}{N_A} \cdot \frac{3 \cdot 12,01 \cdot 1,01}{3 \cdot 12,01 + 4 \cdot 1,01} \text{ g mol}^{-1} = 491,94 \text{ N m}^{-1}$$

A Z-H kötés erőállandója:

$$k(\text{Z-H}) = k(\text{C-H}) \cdot \frac{\Delta_{\text{köt}} H(\text{Z-H})}{\Delta_{\text{köt}} H(\text{C-H})}$$

$$= 491,94 \text{ N m}^{-1} \cdot 450,2 \text{ kJ mol}^{-1} \cdot [438,4 \text{ kJ mol}^{-1}]^{-1} = 505,18 \text{ N m}^{-1}$$

Z és atomtömege:

$$\frac{3M(\text{Z}) \cdot M(\text{H})}{3M(\text{Z}) + 4M(\text{H})} = \frac{k(\text{Z-H}) \cdot N_A}{[2\pi \cdot c \cdot \tilde{\nu}(\text{Z-H})]^2}$$

$$M(Z) = \frac{4}{3} \cdot \left(\frac{[2\pi \cdot c \cdot \tilde{\nu}(Z-H)]^2}{k(Z-H) \cdot N_A} - \frac{1}{M(H)} \right)^{-1} =$$

$$= \frac{4}{3} \cdot \left(\frac{[2\pi \cdot 3 \cdot 10^{10} \cdot 2938,45]^2}{505180 \cdot 6,022 \cdot 10^{23}} - \frac{1}{1,01} \right)^{-1} \text{ g mol}^{-1} = 72,68 \text{ g mol}^{-1}$$

Tehát Z is a Ge.

Megj.: Még ha a nem pontos kerekítés folytán nem ugyanez az eredmény adódik (± 2), akkor is megtalálható a Ge, hisz a szénnel analóg vegyületeket ad.

5.1 Az (1) reakció aktuális $\Delta G'$ értéke:

$$\Delta G' = \Delta G^{\circ'} + RT$$

$$\ln \frac{c(\text{ADP}^{3-})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot c(\text{HPO}_4^{2-})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}}{c(\text{ADP}^{4-})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}} =$$

$$-30,5 \text{ kJ mol}^{-1} + 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \cdot 298,15 \text{ K} \cdot \ln (0,00025 \cdot 1,65 / 2,225) =$$

$$= -51,8 \text{ kJ mol}^{-1}$$

5.2 A (2) reakció K' egyensúlyi állandója és a $c(\text{glükóz-6-foszfát}) / c(\text{glükóz})$ hányados:

$$K' = e^{-\Delta G^{\circ'}/RT} = e^{-13800 \text{ J/mol} / (8,314 \text{ J/(mol K)} \cdot 298,15 \text{ K})} = 0,0038$$

$$K' = \frac{c(\text{glükóz-6-foszfát})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}}{c(\text{glükóz})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot c(\text{HPO}_4^{2-})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}}$$

$$\frac{c(\text{glükóz-6-foszfát})}{c(\text{glükóz})} = K' \cdot c(\text{HPO}_4^{2-}) \cdot (1 \text{ mol dm}^{-3})^{-1} = 0,0038 \cdot 0,00165 =$$

$$= 6,3 \cdot 10^{-6}$$

5.3 A (3) reakció $\Delta G^{\circ'}$ értéke és K' egyensúlyi állandója és a $c(\text{glükóz-6-foszfát}) / c(\text{glükóz})$ hányados:

$$\Delta G^{\circ'}(3) = \Delta G^{\circ'}(1) + \Delta G^{\circ'}(2) = -30,5 \text{ kJ mol}^{-1} + 13,8 \text{ kJ mol}^{-1} =$$

$$= -16,7 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$K' = e^{-\Delta G^{\circ'}/RT} = e^{16700 \text{ J/mol} / (8,314 \text{ J/(mol K)} \cdot 298,15 \text{ K})} = 843$$

$$K' = \frac{c(\text{glükóz-6-foszfát})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot c(\text{ATP}^{3-})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}}{c(\text{glükóz})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot c(\text{ATP}^{4-})/1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}}$$

$$\frac{c(\text{glükóz-6-foszfát})}{c(\text{glükóz})} = K' \cdot \frac{c(\text{ATP}^{4-})}{c(\text{ADP}^{3-})} = 843 \cdot 2,25 \text{ mol m}^{-3} / 0,25 \text{ mol m}^{-3}$$

$$= 7587$$

5.4 a) A naponta képződő ATP tömege:

Az ATP szintézisre fordítódó energia: $8000 \text{ kJ nap}^{-1} \cdot 0,5 = 4000 \text{ kJ nap}^{-1}$

A képződő ATP: $4000 \text{ kJ nap}^{-1} / 52 \text{ kJ mol}^{-1} = 76,9 \text{ mol nap}^{-1}$

Tömege: $76,9 \text{ mol nap}^{-1} \cdot 503 \text{ g mol}^{-1} = 38700 \text{ g nap}^{-1} = 38,7 \text{ kg nap}^{-1}$

5.4 b) Az ATP tömege a testben:

Az átlagos élettartam alatt a teljes mennyiségnek újra kell képződnie:

Össztömeg = Élettartam · Keletkezési sebesség =

$= 1440^{-1} \text{ nap} \cdot 38,7 \text{ kg nap}^{-1} = 26,9 \text{ g}$

5.4 c) A maradék szabadenergia:

az ember testét melegíti fel.

5.5 a) Hány hidrogénion van egy mitokondriumban?

$V = 4/3 \pi r^3 = 4/3 \pi (0,5 \cdot 10^{-6} \text{ m})^3 = 5,2 \cdot 10^{-19} \text{ m}^3 = 5,2 \cdot 10^{-16} \text{ dm}^3$

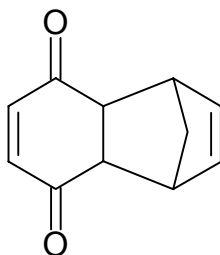
$n = V \cdot c \cdot N_A = 5,2 \cdot 10^{-16} \text{ dm}^3 \cdot 10^{-7} \text{ mol dm}^{-3} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} = 31$

5.5 b) Hány hidrogénion belépése kell 0,2 fg ATP képződéséhez?

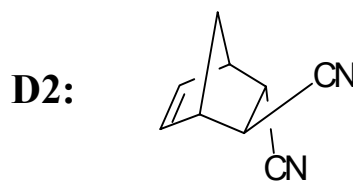
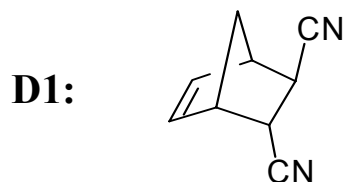
$$n(ATP) = \frac{m(ATP) \cdot N_A}{M(ATP)} = \frac{0,2 \cdot 10^{-15} \text{ g} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}}{503 \text{ g mol}^{-1}} = 239400$$

Sejtenként kell $n(H^+) = n(ATP) \cdot 3 = 718300$.

Mitokondriumonként kell 718 proton belépése.

6.1 A szerkezete:

6.2 D1 és D2 szerkezete:



Megj.: A két vegyület enantiomer.

6.3 B sztereoizomerei közül izolálható: a 2 jelű

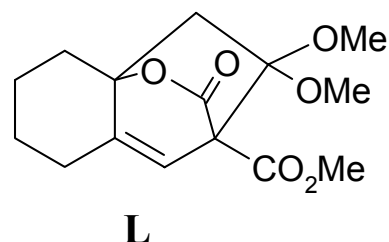
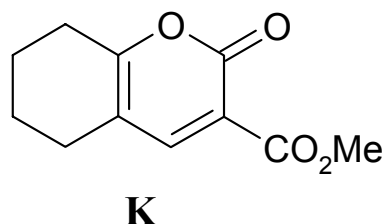
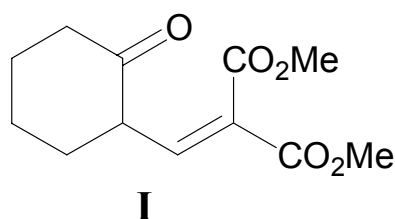
Megj.: A Diels-Alder reakció termékei endo-sztereoekémiát mutatnak, ahogy azt a 6.2 feladatban C szerkezetén is látszott. Az endo- konfigurációt az jellemzi, hogy a két H atom és az áthidalt rendszer CH_2 -hídja a gyűrű megegyező oldalán lesz. A hat lehetséges sztereoizomerből csak 1 és 2 mutat endo,endo sztereoekémiát. A többiben legalább egy exo konfiguráció is van. Az 1-es szerkezetben a három gyűrű egy U-alakú molekulát ad, ami sztérikusan jobban gátolt, mint a 2-es cikkcakkos szerkezete.

6,3 B hat sztereoizomerje (1–6) közül melyik volt az az egy, amit izoláltak? Segítség: vedd figyelembe C sztereospecifikus szerkezetét, a sztérikusan kevésbé gátolt alternatíva képződik.

6.4 A Diels-Alder reakcióval kapcsolatos állítások

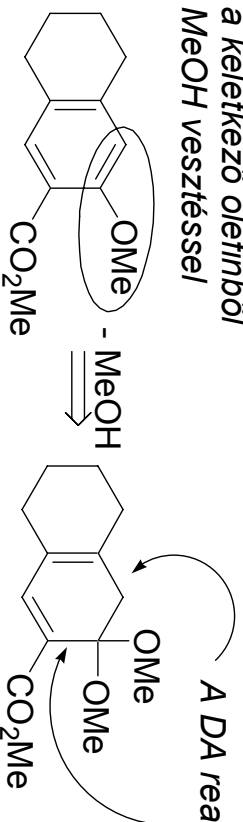
- Igaz: A Diels-Alder reakció reverzibilis (megfordítható)
- Hamis: Az eredeti reakcióban B képződése termodinamikailag kontrollált.
- Hamis: B termodinamikai szempontból stabilabb, mint E.
- Igaz: E termodinamikai szempontból kevésbé stabil, mint F.
- Hamis: G enantiomerje B-nek.
- Nem eldönthető: G termodinamikai szempontból stabilabb F-nél.

6.5 I, K, L szerkezete:

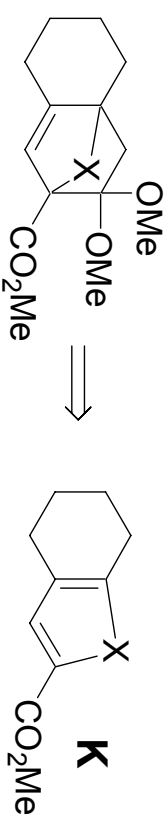


Megj.: A reakciósort visszafelé átgondolva:

a keletkező olefinből
MeOH vesztéssel



A DA reakcióban keletkező kötések

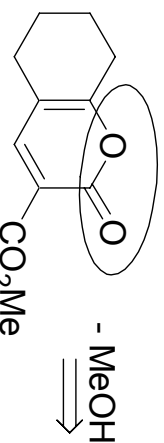
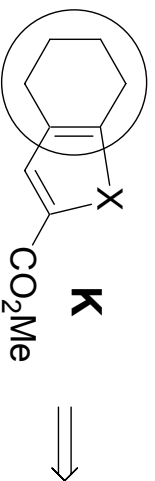


C₁₃H₁₆O₃
termék

a kapott DA ciklohexén adduktból
dién kell keletkezzen CO₂ vesztéssel

L X = CO₂
C₁₅H₂₀O₆

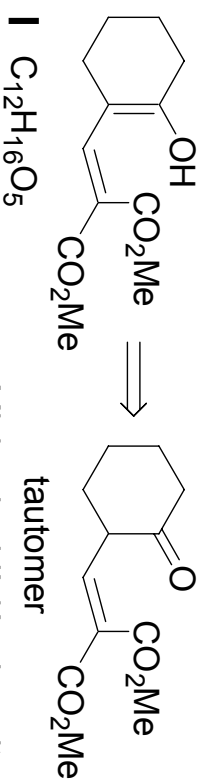
X = CO₂
C₁₁H₁₂O₄
1,3-dién
kell legyen



Ez a részlet a
kiindulási
ciklohexenon

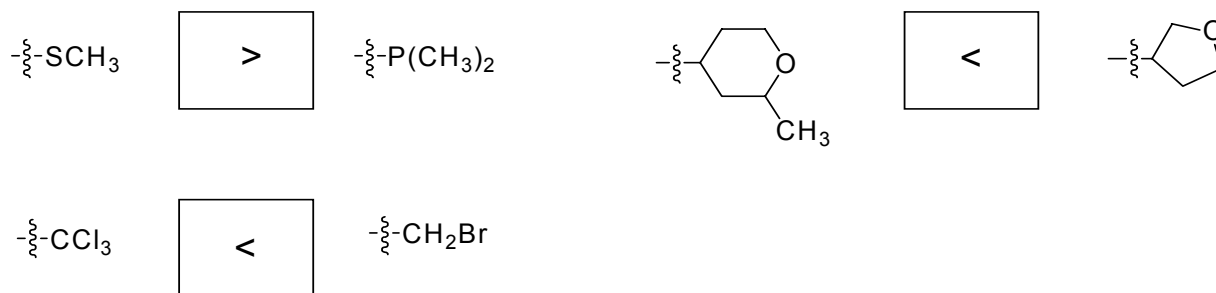
X = CO₂

laktón = átészterezés
történt MeOH vesztéssel

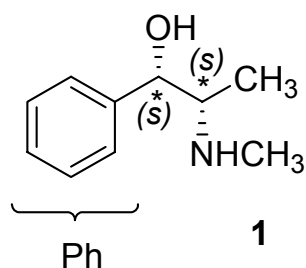


Michael addícióval, amit
MeOH vesztés követ

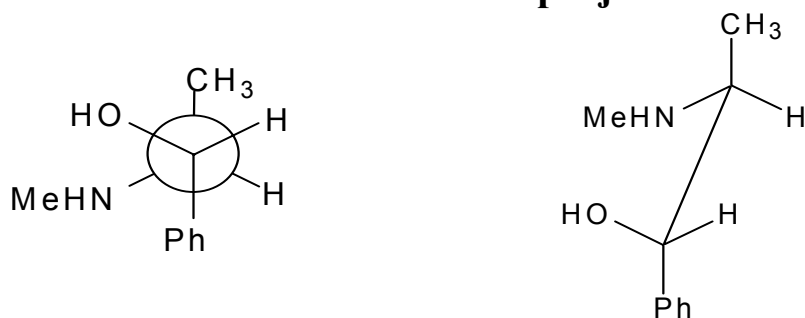
7.1 A CIP-rendszer szerinti prioritások::



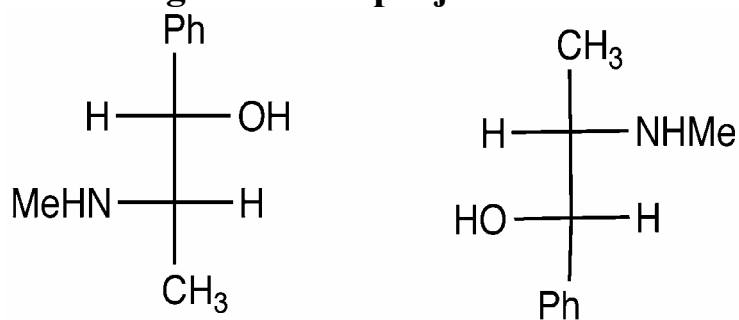
7.2



7.3 A Newman és a fűrészbak projekció:

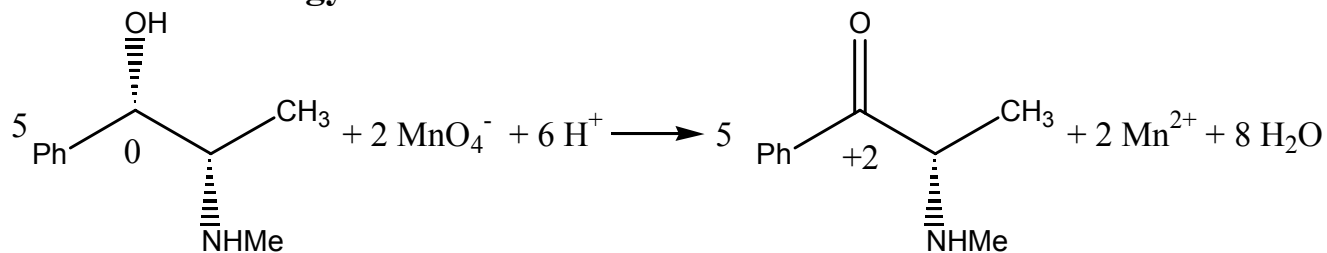


A lehetséges Fischer projekciók:

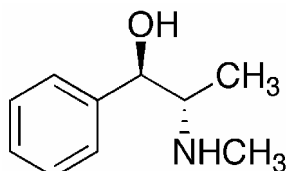


(Me = CH₃)

7.4 A rendezett egyenlet oxidációs számokkal és sztereokémiával:



7.5a) 3 szerkezete:

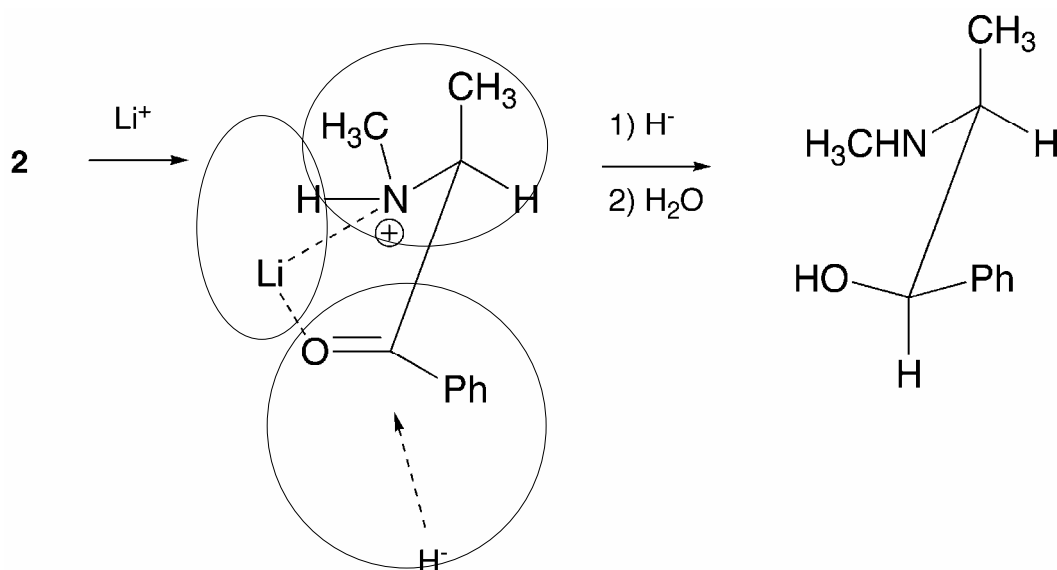


7.5 b) Az izomerek

ik:

- igaz: **1** és **3** sztereoizomerek.
- hamis: **1** és **3** enantiomerek.
- igaz: **1** és **3** diasztereomerek.
- hamis: **1** és **3** konformációs izomerek.

7.5c) Miért csak 3 keletkezik?



Megj.: A hidrid ion a szterikusan kevésbé gátolt oldalról történik. Teljes értékűnek tekintették a hidrogénkötést alkalmazó magyarázatot is.

8.1 A B oldat pH-ja:

$$K_{b2} = \frac{10^{-14}}{10^{-10.33}} = 2,14 \cdot 10^{-4}$$

$$K_{b1} = 2,34 \cdot 10^{-8}$$

Minthogy $K_{b2} \gg K_{b1}$, csak a CO_3^{2-} első protonálódási lépését kell figyelembe venni.

$$c(\text{HCO}_3^-) = c(\text{OH}^-) = x \quad \text{és} \quad c(\text{CO}_3^{2-}) = c_0(\text{CO}_3^{2-}) - x$$

$$c_0(\text{Na}_2\text{CO}_3) = \frac{1,700 \text{ g dm}^{-3}}{105,99 \text{ g mol}^{-1}} = c_0(\text{CO}_3^{2-}) = 0,016 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$K_{b2} = \frac{x^2 / (1 \text{ mol dm}^{-3})}{(c_0(\text{CO}_3^{2-}) - x)}$$

$$x = c(\text{OH}^-) = 1,75 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$$

$$\text{pH} = 11,2$$

8.2 Van-e $\text{Ca}(\text{OH})_2$, CaCO_3 a csapadékban?

$$M(\text{CaCl}_2) = 110,98 \text{ g mol}^{-1} \quad \text{pH} = 10, \quad c(\text{OH}^-) = 10^{-4} \text{ mol dm}^{-3}$$

$$c_0(\text{Na}_2\text{CO}_3) = \frac{1,700 \text{ g dm}^{-3}}{105,99 \text{ g mol}^{-1} \cdot 2} \quad c(\text{CaCl}_2) = \frac{1,780 \text{ g dm}^{-3}}{110,98 \text{ g mol}^{-1} \cdot 2}$$

$$c_0(\text{Na}_2\text{CO}_3) = 8,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3} \quad c(\text{CaCl}_2) = c_0(\text{Ca}^{2+}) = 8,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$$

$$\text{A } \text{Ca}(\text{OH})_2\text{-ra: } c(\text{OH}^-)^2 \cdot c_0(\text{Ca}^{2+}) = 8 \cdot 10^{-11} \text{ mol}^3 \text{ dm}^{-9}$$

Ez kisebb, mint az oldhatósági szorzat, csapadék nincs.

A CaCO_3 -ra:

$$K_{b2} = \frac{c(\text{HCO}_3^-) \cdot c(\text{OH}^-)}{c(\text{CO}_3^{2-})} \quad c(\text{HCO}_3^-) + c(\text{CO}_3^{2-}) = c_0(\text{Na}_2\text{CO}_3)$$

$$c(\text{HCO}_3^-) = \frac{K_{b2}}{c(\text{OH}^-)} \cdot c(\text{CO}_3^{2-}) = 2,14 \cdot c(\text{CO}_3^{2-})$$

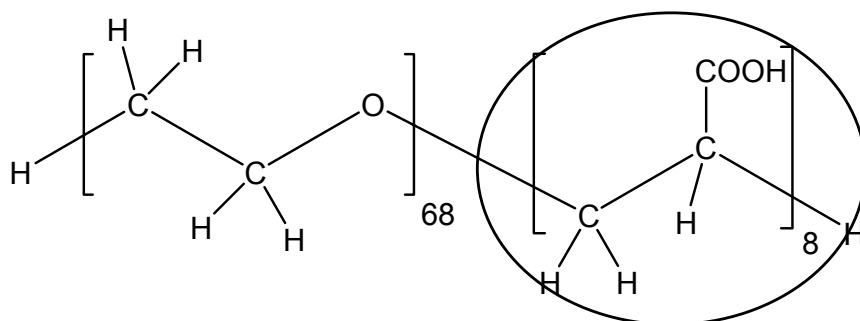
$$2,14 \cdot c(\text{CO}_3^{2-}) + c(\text{CO}_3^{2-}) = 8,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$$

$$c(\text{CO}_3^{2-}) = 2,55 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$$

$$c(\text{CO}_3^{2-}) \cdot c(\text{Ca}^{2+}) = 2,04 \cdot 10^{-5} \text{ mol}^2 \text{ L}^{-2}$$

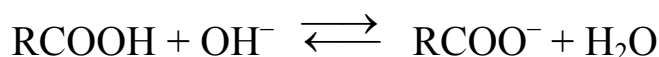
Ez nagyobb, mint az oldhatósági szorzat, csapadék leválik.

8.3 A CaCO_3 kristályhoz kapcsolódó blokk:



Megj.: Mindkét blokk hidrofíl. Az akrilsav blokk fog elsősorban a kristályhoz kapcsolódni, mert jobban polarizált és részben töltött. Olyan helyeken kapcsolódik a felülethez, ahol kalcium ionok vannak feleslegben.

8.4 Mennyi van a polimerből a hibrid részecskékben?



Mivel $\text{pH} \gg \text{pK}_s$, az összes karbonsav csoport disszociált. A hidroxid-ionok fogyásából megállapítható a karbonsav-csoportok koncentrációja:

$$c_0(\text{OH}^-) = \frac{50 \text{ ml}}{250 \text{ ml}} 0,19 \text{ mol dm}^{-3} = 0,038 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$c(\text{OH}^-) = 10^{-1,7} \text{ mol dm}^{-3} = 0,02 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$c_0(\text{COOH}) = c_0(\text{OH}^-) - c(\text{OH}^-) = 0,018 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$$

A polimer koncentrációja ennek nyolcada.

$$M(\text{polimer}) = M(\text{C}_{160}\text{O}_{84}\text{H}_{306}) = 3574,66 \text{ g mol}^{-1}$$

$$m(\text{polimer}) = c(\text{polimer}) \cdot V \cdot M(\text{polimer}) = \frac{0,018 \cdot 0,250 \cdot 3574,66}{8} \text{ g} = 2,0 \text{ g}$$

8.5 A CaCO_3 módosulat:

A részecskék töltését a teljesen disszociált COOH csoportok okozzák. Egy részecskére jut 800 karbonsavcsoport tehát.

Ez 100 polimernek felel meg részecskénként.

A részecske moláris tömegét tekintve:

$$M(\text{CaCO}_3) = M(\text{teljes}) - N_{\text{polimer}} \cdot M(\text{polimer})$$

$$M(\text{CaCO}_3) = 8,01 \cdot 10^8 \text{ g mol}^{-1} - 100 \cdot 3574,66 \text{ g mol}^{-1} = 8,01 \cdot 10^8 \text{ g mol}^{-1}$$

Egy részecske tömegéből és térfogatából ($V = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3$) kiszámítható a sűrűség:

$$\rho(\text{CaCO}_3) = \frac{3(M(\text{CaCO}_3))}{N_a \cdot 4\pi \cdot r^3} = \frac{3 \cdot 8,01 \cdot 10^8 \text{ g mol}^{-1}}{N_A \cdot 4\pi (5 \cdot 10^{-6} \text{ cm})^3} = 2,54 \text{ g cm}^{-3}$$

A keletkező módosulat a vaterit.

Gyakorlati feladatok

1.1 Az elméletileg kapható biszfenol A:

$$M_1 (\text{polikarbonát}) = M_1 (\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{O}_3)_n \text{H}_2 \approx M_1 (\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{O}_3) = 254,30 \text{ g/mol}$$

$$m_1 = 2,54 \text{ g} \quad M_2 (\text{C}_{15}\text{H}_{16}\text{O}_2) = 228,31 \text{ g/mol}$$

$$m_2 = m_1 \cdot M_1^{-1} \cdot M_2 = 2,28 \text{ g}$$

1.2 Az elméletileg kapható biszfenol A-bisz(karboximetil)éter:

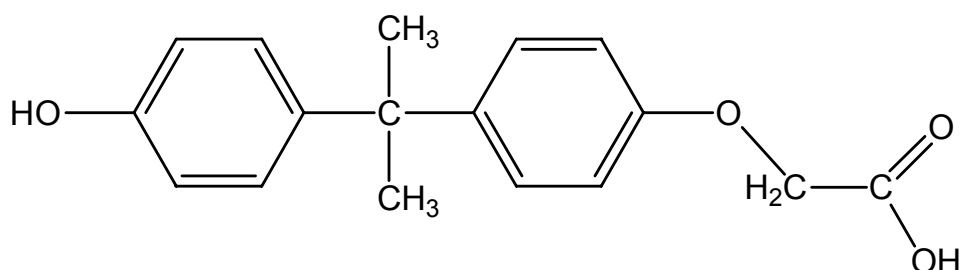
$$M_2 (\text{C}_{15}\text{H}_{16}\text{O}_2) = 228,31 \text{ g/mol} \quad M_3 (\text{C}_{19}\text{H}_{20}\text{O}_6) = 344,39 \text{ g/mol}$$

$$m_2 = 2,00 \text{ g}$$

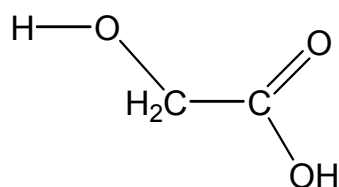
$$m_3 = m_2 \cdot M_2^{-1} \cdot M_3 = 3,02 \text{ g}$$

1.3 A melléktermékek:

a. A biszfenol A csak egy klóracetáttal reagál (monoszubsztitúció):



b. A klóracetát lúgos hidrolízise:

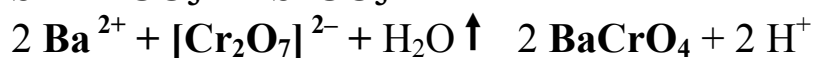
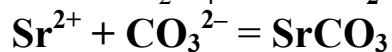
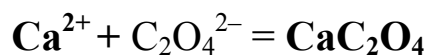


1.4-1.7

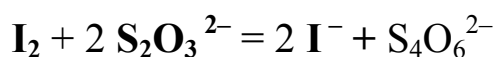
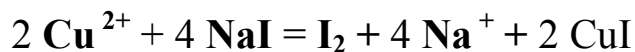
Az első lépésben elvárt termelés és O.p.: 91-95%, 155,7-156,2°C.

A második lépésben elvárt termelés és O.p.: 70-80%, 172-174°C.

2.1 A mintában csak bárium volt. Az egyenletek:



2.3 Az egyenletek:



2.4

A réz mennyisége:

$$V(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3) \cdot 0,01 \text{ mol/dm}^3 \cdot 4 \cdot 10/1000 \cdot M(\text{Cu})$$

A lantán mennyisége:

$$[V(\text{EDTA}) - (V(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3)/10 \cdot 4)] \text{ ml} \cdot 0,1 \text{ mol/dm}^3 \cdot 10/1000 \cdot M(\text{La})$$

2.5

A lantánra fogyó EDTA: $[11,76 - (10,50/10 \cdot 4)] \text{ ml} = 7,56 \text{ ml}$

A lantánra fogyó EDTA: $11,76 \text{ ml} - 7,56 \text{ ml} = 4,20 \text{ ml}$

$$n(\text{La}) : n(\text{Cu}) = 7,56 : 4,2 = 1,8 : 1$$

$$x = 1,8 \quad \text{a képlet: } \text{La}_{1,8}\text{Ba}_{0,2}\text{CuO}_4$$