

GONDOLKODÓ



A 2019/2020. tanév pontversenyeinek végeredménye

Az alábbiakban közöljük az egyes kategóriákban kiemelkedő eredményt elért diákok névsorát. Elektronikus úton minden résztvevő megkapta a pontszámait. Két támogatónk (Hildegard Alapítvány és Hiflylabs Zrt.) köszönhetően mindannyian 10-50 ezer forintos jutalomban részesülnek, bár a személyes átadás az MKE közgyűlésén elmarad az idén.

Gratulálunk az eredményekhez, és bízunk benne, hogy a jövő tanévben is sokan belevágnak a feladatmegoldásba!

K pontverseny (9-10. osztály csapatverseny)

	Név, iskola	Felkészítő tanár	Pontszám
1	Nátrium-hidroxid (Bodnár Mária, Cseke Julianna) Széchenyi István Gimnázium, Sopron	Kiss-Huszta Pálma	160,1
2	BFC12 (Bíró Gergő, Ujhelyi Zsófia, Molnár Evelin) Jedlik Ányos Gimnázium, Budapest	Elekné Becz Beatrix	155,5

K pontverseny (9. osztály)

	Név, iskola	Felkészítő tanár	Pontszám
1	Nemeskéri Dániel ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium	Sebő Péter	191
2	Szabó Márton Péter András Gimnázium és Kollégium, Szeghalom	Dr. Tabiné Lehotai Klára	183,5
3	Papp Marcell Imre ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium	Sebő Péter	170,5

K pontverseny (10. osztály)

	Név, iskola	Felkészítő tanár	Pontszám
1	Sajósi Benedek ELTE Apáczai Csere János Gyakorlógimnázium	Sebő Péter, Sebőné Bagdi Ágnes	199
2	Tóth Nóra Katona József Gimnázium, Kecskemét	Sáróné Jéga-Szabó Irén, Tóth Zsolt	196
3	Horváth Emese Dorka Városmajori Gimnázium, Budapest	Nagyné Hodula Andrea	179,6
4	Papp Marcell Miklós Herman Ottó Gimnázium, Miskolc	Molnár Krisztina, Juhász Attila	172,45

K pontverseny (11-12. osztály)

	Név, iskola	Felkészítő tanár	Pontszám
1	Lovas Miklós Tóth Árpád Gimnázium, Debrecen	Dr. Várallyainé Balázs Judit	168,2
2	Karvaly Krisztián Márk VSzC Ipari Szakgimnázium, Veszprém	Pulai Gáborné	167
3	Kósa Zoltán ELTE Apáczai Csere János Gyakorlógimnázium	Sebő Péter	138,7

H pontverseny

	Név, iskola	Felkészítő tanár	Pontszám
1	Debreczeni Dorina Bocskai István Gimnázium, Hajdúböszörmény	Németi Edit, Bárány Zsolt	169,5
2	Benkő Dávid Budapesti Fazekas Mihály Gyak. Ált. Isk. és Gimn.	Albert Attila	169,25
3	Simon Vivien Klaudia ELTE Apáczai Csere János Gyakorlógimnázium	Sebő Péter	159,5

Angol fordítási verseny

	Név, iskola	Felkészítő tanár	Pontszám
1	Horváth Lilla Táncsics Mihály Gimnázium, Kaposvár	Kertész Róbert	395,5
2	Karvaly Krisztián Márk VSzC Ipari Szakgimnázium, Veszprém	Pulai Gáborné, Szathmáry Edina	389,3

3	Ambrus Barbara ELTE Apáczai Csere János Gyakorlógimnázium	Sebő Péter	387,9
---	--	------------	-------

Német fordítási verseny

	Név, iskola	Felkészítő tanár	Pontszám
1	Molnár Dóra Eötvös József Gimnázium, Budapest	Sándor István, Fészki Viktória	196
2	Klonka Áron Zentai Gimnázium	Máriás Ildikó, Nagy Horti Orsolya	160
3	Tóth Zsanett Széchenyi István Gimnázium, Sopron	Kiss-Husztza Pálma, Mikóné Szántó Réka	124,5

Keressd a kémiát!

	Név, iskola	Felkészítő tanár	Pontszám
1	Horváth Lilla Táncsics Mihály Gimnázium, Kaposvár	Kertész Róbert	108,5
1	Lovas Miklós Tóth Árpád Gimnázium, Debrecen	Dr. Várallyainé Balázs Judit	108
2	Lelkes Máté Vasvári Pál Gimnázium, Székesfehérvár	Szabó Endre	107
3	Bodnár Mária Széchenyi István Gimnázium, Sopron	Kiss-Husztza Pálma	97

A 2019/2020. tanév díjazott felkészítő tanára

Sántha Erzsébet	Szent Orsolya Gimnázium, Sopron
-----------------	---------------------------------

Megoldások

K347. A feladat szövegébe sajnos hiba csúszott: a kérdéses molekulaionban 6, 7, 8 vagy 9 elemi részecske lehet, ha minden szóba jöhető izotópot figyelembe veszünk – 10 nem. Szerencsére a beküldők döntő többségét ez nem zavarta meg, és szinte mindenki rájött a megoldásra.

a) Az elemi részecskék ilyen kis száma ugyanis arra utal, hogy csak a hidrogén- és a héliumatom jöhet szóba. Egy hidrogénatomban 2, 3 vagy 4, egy héliumatomban 5 vagy 6 elemi részecske lehet. Az egyszeres pozitív töltés figyelembevételével már adja is magát a megoldás: HeH^+ .

b) Figyelembe véve a hidrogén három (^1H , ^2H , ^3H) és a hélium két (^3He , ^4He) izotópját, összesen hat izotopológ létezhet. Ezek közül a legritkább izotópokból jön létre a legritkább molekulaion, ami tehát a $^3\text{He}^3\text{H}^+$.

(Érdekes, hogy mindkét elemnek ismertek nagyobb tömegszámú izotópjai, amelyek a természetben nem fordulnak elő, de mesterségesen előállíthatók. Furcsa módon ezek közül mindkettő esetén éppen az a legrövidebb felezési idejű, aminek a felhasználásával kijöhetne a 10 elemi részecske. A ^4H felezési ideje $1 \cdot 10^{-22}$ s nagyságrendű, az ^5He felezési ideje pedig kb. $7 \cdot 10^{-22}$ s. Ennél meghökkentően stabilabb pl. a ^6He és a ^8He (0,8 s és 0,1 s!), de még a ^{10}He is egy nagyságrenddel nagyobb felezési idejű.)

Nagyon sok tökéletes megoldás érkezett, ennek megfelelően a pontátlag igen magas.

(Zagyai Péter)

K348. a) Tegyük fel, hogy azonos hőmérsékleten vizsgáljuk a földi és a marsi légkört. Ekkor igaz, hogy:

$$p_{\text{Mars}} V_{\text{O}_2, \text{Mars}} = p_{\text{Föld}} V_{\text{O}_2, \text{Föld}}$$

Könnyű kiszámolni, hogy a marsi légkörben 1 m^3 levegőben $1,6 \text{ dm}^3$ oxigén van. Ez a földi nyomáson: $9,63 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3$ térfogatnak felel meg a következő számolás szerint:

$$p_{\text{Mars}} V_{\text{O}_2, \text{Mars}} = p_{\text{Föld}} V_{\text{O}_2, \text{Föld}}$$

$$610 \text{ Pa} \cdot 1,6 \text{ dm}^3 = 101325 \text{ Pa} \cdot V_{\text{O}_2, \text{Föld}}$$

$$V_{\text{O}_2, \text{Föld}} = \frac{610 \text{ Pa} \cdot 1,6 \text{ dm}^3}{101325 \text{ Pa}}$$

$$V_{\text{O}_2, \text{Föld}} = 9,63 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3$$

Azt is tudjuk, hogy a földi levegő 21 térfogatszázalék oxigént tartalmaz, azaz 1 m^3 levegőben 210 dm^3 oxigén található. Ebből már következik egy egyszerű osztással, hogy a Földön 1 m^3 levegőben 21516-szor több oxigén van, mint a Marson.

$$\frac{210 \text{ dm}^3}{9,63 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3} \approx 21516,4$$

b) Tudjuk, hogy télen a szén-dioxid egy része kifagy a marsi légkörből. Ennek mennyisége könnyen kiszámolható:

$$94,4\% = \frac{(951 - x) \text{ dm}^3}{(1000 - x) \text{ dm}^3} \cdot 100$$

$$0,944 = \frac{951 - x}{1000 - x}$$

$$944 - 0,944x = 951 - x$$

$$0,056x = 7$$

$$x = 125$$

Vagyis 125 dm^3 szén-dioxid fagyott ki. Ebből könnyű kiszámolni az oxigén új térfogatszázalékát:

$$\frac{1,6 \text{ dm}^3}{(1000 - 125) \text{ dm}^3} \cdot 100 = 0,183\%$$

Azaz az oxigén mennyisége télen 0,183 térfogatszázalék.

A feladat közepesen nehéznek bizonyult. Nagyon sok szép feladatot olvastunk, változatos ötletekkel. A feladat szövegéből sajnos kimaradt az „azonos hőmérséklet”, de nagyon sokan rájöttek, hogy csak így lehet megoldani. Sokan próbálkoztak egyéni megoldási ötletekkel a feladat b) részében, de ezek a legtöbb esetben nehezen voltak követhetők, és ritkán vezettek helyes megoldásra.

(Jantner Anna)

K349. A feladatban szereplő elnevezések az alábbi elemeket takarják:

Elnevezés	Elem	Elnevezés	Elem
lomany	platina	nemiszany, imany	tantál
napany, kemeny	titán	arany	arany
férjany	arzén	bátrany	bizmut
menyany, sárgany	urán	iblany	jód
szerdany, higany	higany	ingerlany, ződany	nikkel
lágany	molibdén	édeny	berillium

Közülük a jód alkot minden másik elemmel vegyületet, ezek képlete:

Elem	Vegyületek	Elem	Vegyületek
platina	PtI ₂ , PtI ₃ , PtI ₄	tantál	TaI ₄ , TaI ₅
titán	TiI ₂ , TiI ₃ , TiI ₄	arany	AuI
arzén	AsI ₃	bizmut	BiI ₃
urán	UI ₃ , UI ₄	nikkel	NI ₂
higany	HgI ₂ , Hg ₂ I ₂	berillium	BeI ₂
molibdén	MoI ₂ , MoI ₃		

(Bacsó Zsófia Réka)

K350. A $2 \cdot 10^{-9}$ g tömegű, ^{21}Ne atomra nézve $(1,98 \pm 0,15) \cdot 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{g}$ koncentrációjú minta $2 \cdot 10^{-9} \cdot (1,98 \pm 0,15) \cdot 10^{-6} = (3,96 \pm 0,30) \cdot 10^{-15} \text{ cm}^3$, azaz $(3,96 \pm 0,30) \cdot 10^{-21} \text{ m}^3$ -nyi ^{21}Ne -t tartalmaz szobahőmérsékleten, standard nyomáson. Ennek a gáznak az anyagmennyisége:

$$n = \frac{pV}{RT} = \frac{10^5 \cdot (3,96 \pm 0,30) \cdot 10^{-21}}{8,314 \cdot 298} = (1,5983 \pm 0,1211) \cdot 10^{-19} \text{ mol}$$

A kapott értéket az Avogadro-állandóval megszorozva kapjuk meg a ^{21}Ne atomok számát.

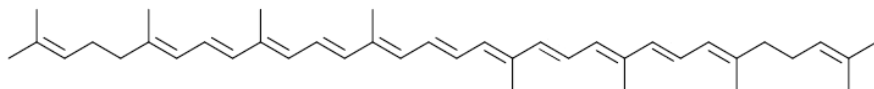
$$N = N_A \cdot n = 6 \cdot 10^{23} \cdot (1,5983 \pm 0,1211) \cdot 10^{-19} = \\ = 95900 \pm 7265$$

Tehát a vizsgált minta körülbelül 88600 – 103200 darab ^{21}Ne atomot tartalmazhatott.

Hibátlan megoldást küldött be Horváth Emese Dorka, Karvaly Krisztián Márk, Kósa Viola, Sajósi Benedek és Tóth Nóra. Az átlagpontszám 8,1 pont lett.

(Balbisi Mirjam)

K351. a) Az all-transz-likopin szerkezete:



b) A likopin molekulájában összesen 13 darab kettős kötés található, de ezek közül csak 11 kötésnél lép fel geometriai izoméria. A molekula szimmetrikus, ez az izomerek számát csökkenti, így összesen 6 különböző izomer létezik egy cisz konfigurációjú kötés esetén.

c) Jódban gazdag élelmiszer például a tengeri hal, tengeri alga, kagyló, tojás, burgonya, jódozott só. A diallil-triszulfid a hagymafélékben, fokhagymában, a lentionin a shiitake gombában található meg nagy mennyiségben. Allil-izotiocianátot mustár, torma vagy wasabi felhasználásával tudunk az ételbe juttatni. Ezekkel célszerű a paradicsomot együtt főzni, hogy az izomerizációt elősegítsük.

(Bacsó Zsófia Réka)

K352. a) Azonos állapotú gázok relatív sűrűsége azonos a moláris tömegeik hányadosával. Mivel a vízgőz sűrűsége kisebb a levegőénél (mert kisebb a moláris tömege), így a nedves levegő kisebb sűrűségű. A relatív sűrűség maximuma teljesen száraz levegő esetén 1, az alsó határ a vízgőzzel telített levegő relatív sűrűsége.

Az univerzális gáztörvénynek megfelelően:

$$p_{\text{H}_2\text{O}} \cdot V = n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot R \cdot T \\ p_{\text{összes}} \cdot V = n_{\text{összes}} \cdot R \cdot T$$

Osszuk el egymással a két egyenletet, így megkapjuk a víz móltörtjét:

$$x_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{p_{\text{H}_2\text{O}}}{p_{\text{összes}}} = \frac{n_{\text{H}_2\text{O}}}{n_{\text{összes}}}$$

A száraz levegő átlagos moláris tömege:

$$0,7808 \cdot 28,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 0,2095 \cdot 32 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 0,0093 \cdot 39,95 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 0,0004 \cdot 44,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 28,96 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

A 0 °C-on vízgőzzel telített (0,06% víz) levegő moláris tömege:

$$0,994 \cdot 28,96 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 0,006 \cdot 18,02 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 28,89 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

Tehát a relatív sűrűség alsó határa:

$$\rho_{\text{relatív}} = \frac{M_{\text{nedves}}}{M_{\text{száraz}}} = \frac{28,89 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{28,96 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,998$$

25°C-on a vízgőz parciális nyomása, így a telített levegő vízgőz tartalma is 5,13-szoros, azaz 3,09%, így a nedves levegő átlagos moláris tömege:

$$0,9691 \cdot 28,96 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 0,0309 \cdot 18,02 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 28,62 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

Így hányadosuk:

$$\rho_{\text{relatív}} = \frac{M_{\text{nedves}}}{M_{\text{száraz}}} = \frac{28,62 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{28,96 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,988$$

100 °C-on már forr a víz, így lehet a levegőben már akár 100% vízgőz is, így az átlagos moláris tömege lehet akár 18,02 g/mol. Így a két véglet hányadosa:

$$\rho_{\text{relatív}} = \frac{M_{\text{nedves}}}{M_{\text{száraz}}} = \frac{18,02 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{28,96 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,622$$

Azaz a relatív sűrűség 0,622 és 1 közé esik.

b) A gáztörvény alapján:

$$\rho = \frac{p \cdot M}{R \cdot T}$$

Mivel a két tartály teljesen azonos, így a felhajtóerő, ami hat rájuk, az is azonos, tehát a mért súlykülönbségből számolt tömegkülönbség ténylegesen megegyezik a tömegkülönbséggel:

Azaz tudjuk a megadott adatok alapján, hogy:

$$V \cdot \rho_1 = V \cdot \rho_2 + 0,001 \text{ g}$$

Ebbe behelyettesítve a 25°C-os adatokat:

$$V \cdot 1184,37 \frac{\text{g}}{\text{m}^3} = V \cdot 1170,47 \frac{\text{g}}{\text{m}^3} + 0,001 \text{ g}$$

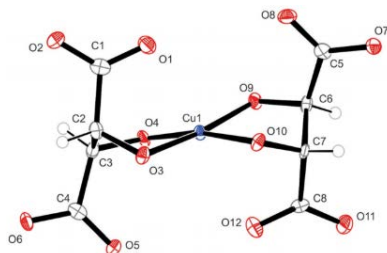
Tehát $V = 72 \text{ cm}^3$ -es tartályok kellenek legalább.

A megoldás Sajósi Benedek munkája. Nem sok beküldő választotta ezt a feladatot, de szinte mindannyian helyesen bántak el a vízpára gőznyomásával.

(Magyarfalvi Gábor)

K353. a) Kiszámolhatjuk, hogy 1 dm^3 $0,217 \text{ mol/dm}^3$ Cu^{2+} koncentrációjú Fehling-oldatban $n = c \cdot V = 0,217 \text{ mol}$ rézgálic van feloldva, aminek tömege: $m = n \cdot M = 0,217 \cdot 159,6 = 34,6 \text{ g}$. Ehhez képest 3,8-szeres a kálium-nátrium-tartarát anyagmennyisége, vagyis $0,825 \text{ mol}$, így abból $0,825 \cdot 210,1 = 173,3 \text{ g}$ kell. Az 5,8-szeres anyagmennyiségű nátrium-hidroxid $1,259 \text{ mol}$, amiből pedig $1,259 \cdot 40 = 50,3 \text{ g}$ szükséges.

b) Az alábbi ábrán látható az ion konstitúciója. A borkósav karboxil- és hidroxilcsoportjairól is leszakad a hidrogénion, így lesz négyszeresen negatív töltésű a savmaradékion, ami a kétszeresen pozitív töltésű réziont megköti.



c) 3,96 g NaOH anyagmennyisége: $n = m/M = 0,099$ mol, a borkósavé $n = 2,402/150,1 = 0,016$ mol és a réz-hidroxid anyagmennyisége $n = 0,878/97,6 = 0,009$ mol.

Mivel a rézion:savmaradékion anyagmennyiség:arány 1:2, láthatjuk, hogy a meghatározó a borkósav anyagmennyisége lesz, ebből következik, hogy a keletkező só anyagmennyisége annak fele, 0,008 mol. Az oldatból 2,85 g sót sikerült kikristályosítani, ami azonban csak 48,3%-a terméknek, így a termék össztömege $2,85/48,3 \cdot 100 = 5,9$ g.

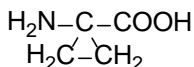
A só moláris tömege: $M = m/n = 5,9/0,008 = 737,5$ g/mol.

A $[\text{Cu}(\text{tart})_2]^{6-}$ részecskéhez kapcsolódó kation csak a nátriumion lehet, így a só képlete $\text{Na}_6[\text{Cu}(\text{tart})_2]$, ennek moláris tömege viszont kisebb a számoltnál, így feltételezhetjük, hogy kristályvizet sőról van szó. A moláris tömeg különbsége 244 g/mol, ami 13,55 mol kristályvíznek felel meg. Tehát az előállított só képlete $\text{Na}_6[\text{Cu}(\text{tart})_2] \cdot 13,55 \text{H}_2\text{O}$.

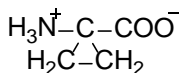
(Bacsó Zsófia Réka)

K354. a) α -aminosav az, ahol a karboxilcsoporthoz képest α helyzetű, vagyis közvetlenül mellette lévő szénatomhoz kapcsolódik az aminocsoport

b, c) **Y** összegképletét megkapjuk, ha a reakcióegyenlet jobb oldalán lévő atomokat összeadjuk és kivonunk belőle 1 oxigénatomot ($1/2 \text{O}_2$ miatt). Tehát **Y** összegképlete $\text{C}_4\text{H}_7\text{NO}_2$, konstitúciója:



és az ikerion szerkezete:

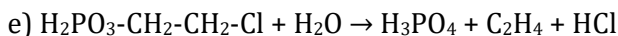


d) A képződő etilén mennyisége annak térfogatából és a moláris térfogatból számolható ki:

$$n(\text{etilén}) = V/V_m = 13,9/24,5 = 0,567 \text{ mmol}$$

1 mol foszforsavszármazékból 1 mol etilén fog képződni, tehát a foszforsavszármazék anyagmennyisége is ugyanennyi volt. Annak moláris tömege kiszámolható: $M = m/n = 82/0,567 = 144,5$ g/mol.

$M(\text{foszforsavszármazék}) = 109 + M(\mathbf{X})$ g/mol, ebből következik, hogy $M(\mathbf{X}) = 35,5$ g/mol, vagyis az \mathbf{X} atom a klór.



f) Azért nem hidrolizál, mert a vegyület vizes oldata savas kémhatású, és a hidrolízis csak lúgos vagy semleges közegben megy végbe.

(Bacsó Zsófia Réka)

K355. Tudjuk, hogy egy kvantumpötty átmérője $4 \text{ nm} = 4 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$, tömege pedig $2,058 \cdot 10^{-19} \text{ g}$. Egy gömb térfogatát a sugárnak ismeretében könnyen kiszámolhatjuk a következő képlet segítségével:

$$V = \frac{4r^3\pi}{3}$$

Itt r a gömb sugara.

$$V = \frac{4 \cdot (2 \cdot 10^7)^3 \cdot \pi}{3} = 3,35 \cdot 10^{-20} \text{ cm}^3$$

Így könnyen ki tudjuk számolni a sűrűségét:

$$\rho = \frac{m}{V}$$

$$\rho = \frac{2,058 \cdot 10^{-19} \text{ g}}{3,35 \cdot 10^{-20} \text{ cm}^3} = 6,14 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

Kicsit nehezebb azt a kérdést megválaszolni, hogy melyik két elem fordul elő a kvantumpöttyben. Mivel tudjuk, hogy 1:1 anyagmennyiség-arányban vannak jelen, ezért biztos, hogy 619-619 darab atom van mind a két elemből. Ekkor, ha az egyik elemben x db proton van a másikban pedig y db, akkor:

$$x + y = \frac{51996}{619} = 84$$

Ez csak akkor lehetséges, ha az egyik elem a 4., a másik elem pedig az 5. periódus eleme. Azaz a lehetséges elempárok: As-Sb; Se-Sn; Ge-Te; Ga-I; Br-In.

A helyes megoldást a tömeg ellenőrzésével kapjuk meg. Az elemek átlagos moláris tömegét megkapjuk, ha egy gömb tömegét elosztjuk az anyagmennyiséggel:

$$\bar{M} = \frac{m}{\frac{N}{N_A}}$$

$$\bar{M} = \frac{2,058 \cdot 10^{-19}}{\frac{1238}{6 \cdot 10^{23}}} = 99,74 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

Ehhez az értékhez pedig a Ge-Te elempár moláris tömege áll a legközelebb.

$$\bar{M} = \frac{72,59 + 127,6}{2} = 100,1 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

A feladat közepesen nehéznek bizonyult. Nagyon sok szép feladatot olvastunk, változatos ötletekkel. Általában azzal gyűlt meg a megoldók baja, hogy nem kaptak pontos megoldást, és nem keresték meg, hogy melyik átlagos moláris tömeg áll a legközelebb a megoldáshoz.

(Jantner Anna)

K356. a) Esetünkben a CH₆-os potencia alapján 6-szor egymás után a századrészére hígítjuk a 0,5 g hatóanyagot tartalmazó mintánkat. Ez összességében 100⁶-szoros, azaz ezermilliárdszoros hígítást jelent. Tehát végeredményben a 0,5 g hatóanyag ezermilliárdszor ekkora tömegű, azaz 500 milliárd g „gyógyszerben” lesz megtalálható.

Ebből a „gyógyszerből” naponta legfeljebb háromszor vehetünk be 1-1 grammnyi adagot, azaz naponta összesen 3 g-ot. Így az 500 milliárd g gyógyszer

$$\frac{500\,000\,000\,000}{3} = 1,667 \cdot 10^{11}$$

nap alatt fogy el. A szökőéveket is figyelembe véve egy év 365,24 napból áll, így tehát a 0,5 g hatóanyagot

$$\frac{1,667 \cdot 10^{11}}{365,24} = 4,563 \cdot 10^8 \text{ év}$$

alatt tudjuk bejuttatni a szervezetünkbe.

b) A napi 3 g homeopátiás „gyógyszer” hatóanyagtartalma az ezermilliárdszoros hígítás alapján:

$$\frac{3 \text{ g}}{1\,000\,000\,000\,000} = 3 \cdot 10^{-12} \text{ g}$$

A 225 g/mol moláris tömeg alapján ennek anyagmennyisége:

$$\frac{3 \cdot 10^{-12} \text{ g}}{225 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 1,333 \cdot 10^{-14} \text{ mol}$$

Az acetil-szalicilsav moláris tömege 180 g/mol, ez alapján az 500 mg, azaz 0,5 g hatóanyag anyagmennyisége:

$$\frac{0,5 \text{ g}}{180 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 2,778 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

Mivel egy anyag anyagmennyisége és a benne található molekulák (amennyiben molekularácsos anyagot vizsgálunk) közt egyenes arányosság van (az arányossági tényező az Avogadro-állandó), így a hatóanyag-molekulák aránya azonos az anyagmennyiségek arányával:

$$\frac{2,778 \cdot 10^{-3} \text{ mol}}{1,333 \cdot 10^{-14} \text{ mol}} = 2,083 \cdot 10^{11}$$

Tehát egyetlen Kalmopyrin tablettá 208,3 milliárdszor több hatóanyag-molekulát tartalmaz, mint a homeopátiás szer napi 3 g-os adagja.

A feladat a versenyzők számára igen könnyűnek bizonyult, sok volt a teljesen helyes megoldás. A kapott pontok átlaga 8,77 volt.

(Csorba Benjámin)

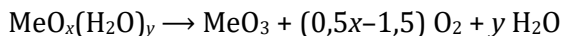
K357. a) A leírás szerint a szuszpenzió 5,0 cm³-es térfogata 20 testtömeg kg-nyi, ezek alapján a 100 cm³-es térfogata 400 testtömeg kg-nyi hatóanyagot tartalmaz. Figyelembe véve, hogy az amoxicillin (C₁₆H₁₉N₃O₅S) moláris tömege 365,4 g/mol, míg a klavulánsavé (C₈H₉NO₅) 199,2 g/mol, a 100 cm³-es szuszpenzióhoz előkészített üvegbe 400 kg·25 mg/kg = 10000 mg, azaz 10 g amoxicillint, illetve 400 kg·18·10⁻³ mol/kg·199,2 g/mol = 1434 g klavulánsavat kellene bemérni. (Utóbbi érték egy 100 cm³-es szuszpenzió esetén irreálisan nagy, a feladatban szereplő klavulánsav ajánlott mennyisége hibásan szerepel.)

b) Mivel mindkét hatóanyag mennyisége 1 óra alatt csökken a felére, az eltelt 4 óra alatt a szervezetben már csak a kiindulási mennyiség $1/16$ -a található meg. A feladat szövegében szereplő adatok alapján egy adag bevétele során amoxicillinből $20 \text{ kg} \cdot 25 \text{ mg/kg} = 500 \text{ mg}$, klavulánsavból $20 \text{ kg} \cdot 18 \cdot 10^{-3} \text{ mol/kg} \cdot 199,2 \text{ g/mol} = 71,7 \text{ g}$ kerül egy 20 kg tömegű gyermek szervezetébe. 4 óra elteltével amoxicillinből $500 \text{ mg}/16 = 31 \text{ mg}$, míg klavulánsavból $71,7 \text{ g}/16 = 4,5 \text{ g}$ marad a szervezetben.

A feladat szövegébe sajnos hiba csúszott, melyet Horváth Emese Dorka és Papp Marcell Imre vettek észre. Azonban a megadott adatokkal így is sokan helyesen számoltak. Összesen 9 hibátlan megoldás érkezett, a beküldött megoldások pontszámainak átlaga 8,8 pont. Külön kiemelendő Horváth Emese Dorka megoldása, aki a feladatban megadott adatok mellett a sokkal realisabb, $18 \text{ mg/testtömeg kg}$ klavulánsav- mennyiséggel is megoldotta a feladatot.

(Vörös Tamás)

K358. Az ásvány bomlásának egyenlete:



$200,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on a keletkező gázok (H_2O és O_2) anyagmennyisége összesen a gáztörvény alapján $0,01203 \text{ mol}$.

$25,00 \text{ }^\circ\text{C}$ -on az O_2 parciális nyomása $9,79 \text{ kPa} - 3,17 \text{ kPa} = 6,62 \text{ kPa}$, a bomlás során keletkező O_2 anyagmennyisége a gáztörvény alapján $1,336 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$.

Ezek alapján kiszámítható az is, hogy a bomlás során keletkező H_2O anyagmennyisége $n_1 - n_2 = 0,01069 \text{ mol}$. A keletkezett víz és oxigén tömege összesen $0,1924 \text{ g} + 0,0428 \text{ g} = 0,2352 \text{ g}$, míg a két termék anyagmennyiség-aránya $8,00 : 1,00$. Azaz a fenti bomlási egyenletben szereplő együtthatók arányára felírható az $y/((x-3)/2) = 8$ összefüggés, melyet átrendezve azt kapjuk, hogy $4x = y + 12$. Mivel x értéke egész szám, annak lehetséges legkisebb értéke 4. Ebben az esetben a keletkezett $1,000 \text{ g} - 0,2352 \text{ g} = 0,7648 \text{ g}$ tömegű MeO_3 anyagmennyisége a reakcióegyenlet alapján a keletkezett O_2 anyagmennyiségének kétszerese, azaz $2,672 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$. A keletkezett oxid moláris tömege $0,7648 \text{ g} / 2,672 \cdot 10^{-3} \text{ mol} = 286,2 \text{ g/mol}$, az

ismeretlen fém moláris tömege pedig 238,2 g/mol, ami jó közelítéssel megfelel az urán moláris tömegének. Belátható, hogy bármely $x > 4$ esetén a fém moláris tömegére 238,2 g/mol-nál nagyobb érték adódna, amelyek egyike sem reális megoldás.

A keresett ásvány tapasztalati képlete tehát $\text{UO}_4(\text{H}_2\text{O})_4$, amely a peroxidkötést is tartalmazó studtite $[(\text{UO}_2)\text{O}_2(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}]$, melyben az urán oxidációs száma +6.

A beküldött megoldások pontszámainak átlaga 6,8 pont. A tapasztalati képletet a megoldók többsége helyesen kiszámította, ezekben az esetekben az egyetlen hiba a studtite-ban lévő peroxidkötés ismeretének hiánya volt.

(Vörös Tamás)

K359. a) Ha egy nanorészecske sugara r , akkor felülete $A = 4r^2\pi$, térfogata $V = 4r^3\pi/3$, tömege $m = V \cdot \rho$, fajlagos felülete $A_f = A/m = 3/(r \cdot \rho)$. Tehát az 5 nm átmérőjű nanorészecske fajlagos felülete $6,22 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{g}$.

b) Ha egy részecske tömegét beszorozzuk a részecskék térfogat-egységben lévő koncentrációjával, akkor megkapjuk a tömegkoncentrációt, amely ebben az esetben: $6,90 \cdot 10^{-5} \text{ g/cm}^3$.

c) Az arany összfelületét megkapjuk, ha a tömegkoncentrációját összeszorozzuk a fajlagos felületével, vagy egy részecske felületét a darabszámmal kifejezett koncentrációval: $43,0 \text{ cm}^2$ az arany felülete 1 cm^3 oldatban.

d) Ha egyetlen arany szemcse felületét elosztjuk a molekula alapterületével, akkor megkapjuk, hogy $7,85 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2 / 2,28 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2 = 344,5$, azaz kb. 344-345 db molekula fér rá.

e) Ugyanezen számításokat a 30 nm szemcseátmérőjű aranykolloiddal is elvégezhetjük. Az a) feladatrészbéli képlet alapján látszik, hogy a két részecske fajlagos felületének aránya a sugaruk arányával egyenlő, azaz a nagyobb részecske fajlagos felülete $5/30 = 1/6$ része a kisebb átmérőjű fajlagos felületének, tehát $1,04 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{g}$.

Tömegkoncentrációja $4,88 \cdot 10^{-5} \text{ g/cm}^3$, összfelülete pedig $5,06 \text{ cm}^2$ 1 cm^3 oldatban.

Az átlagpontszám 8,7. Hibátlan megoldást adott Gulyás Gréta, Horváth Emese Dorka, Karvaly Krisztián Márk, a Nátrium-hidroxid csapat, Stein Félix, és Tóth Nóra.

(Borbás Réka)

K360. A polietilénimin (PEI) összegképletének meghatározásához induljunk ki 100 gramm polimerből, amely tehát 55,81 g szénből, 11,63 g hidrogénből, és 32,56 g nitrogénből áll. Ezeknek az anyagmennyisége rendre 4,651 mol, 11,63 mol, 2,326 mol. Az anyagmennyiségek aránya 2:5:1. Innen pedig adódik a $(C_2H_5N)_n$ tapasztalati képlet.

A molekula részletéből látható, hogy háromféle N atom van benne: N, NH, és NH_2 formában fordul elő. Ha a tapasztalati képletet átírjuk $(C_2H_4NH)_n$ formára, akkor látható, hogy minden két szénatomra átlagosan egy NH csoport esik. Ez viszont csak úgy valósítható meg, hogy ha ugyanannyi NH_2 csoport van, mint harmadrendű nitrogénatom. Figyelembe véve, hogy $2 \text{ mol} \cdot 0,1364 = 0,2728 \text{ mol}$ NH csoport van egy mol $(C_2H_4NH)_n$ -ben, így $(1 - 0,2728)/2 = 0,3636 \text{ mol}$ elágazás van a PEI-ben, azaz 36,36%-a a nitrogénatomoknak elágazást képez. (Megjegyzés: az eredeti feladat szövegében a szénatomok véletlen hibából eredően másodrendűnek lettek minősítve, természetesen csak elsőrendű szénatom szerepel a PEI molekulájában.)

Az átlagpontszám 7,8. Hibátlan megoldást adott Kósa Zoltán, Lovas Miklós, Nemeskéri Dániel, Sajósi Benedek és Tóth Nóra.

(Borbás Réka)

K361. a) Amennyiben puffer segítségével a pH-értéket pontosan beállítjuk, a kérdéses koncentrációk aránya független lesz az etán-1,2-diamin bemérési koncentrációjától, sőt a K_{b1} bázisállandótól is. Természetesen a pontos koncentrációk kiszámításához szükségünk lenne ezekre az adatokra is, ezt viszont nem kérdezte a feladat.

Ha a pH-érték egy oldatban 10, az azt jelenti, hogy ebben az oxóniumionok koncentrációja $[H_3O^+] = 10^{-pH} = 10^{-10} \text{ mol/dm}^3$.

A K_v vízionszorzat alapján a hidroxidionok koncentrációja is kiszámolható az oldatban:

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_v}{[\text{H}_3\text{O}^+]} = \frac{10^{-14}}{10^{-10}} = 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$$

Ez után felírhatjuk a K_{b2} bázisállandóra a következő egyenletet, melyben c_2 jelöli az etán-1,2-diamin kétszeresen protonált, c_1 pedig az egyszeresen protonált ionjának koncentrációját:

$$K_{b2} = \frac{c_2[\text{OH}^-]}{c_1}$$

Innen a kért arányt kifejezve és a behelyettesítést elvégezve:

$$\frac{c_2}{c_1} = \frac{K_{b2}}{[\text{OH}^-]} = \frac{6,33 \cdot 10^{-8}}{10^{-4}} = 6,33 \cdot 10^{-4}$$

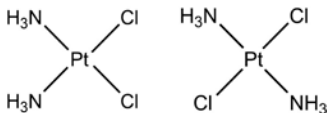
Tehát a kétszeresen protonált és az egyszeresen protonált forma koncentrációjának aránya 10-es pH-n $6,33 \cdot 10^{-4} : 1$. (Másképp fogalmazva az egyszeresen protonált forma koncentrációja 1580-szorosa a kétszeresen protonált formáénak.)

A feladat a versenyzők számára viszonylag könnyűnek bizonyult, sok volt a hibátlan megoldás. Azonban a versenyzők közül szinte senki nem vette észre, hogy felesleges a konkrét koncentrációk meghatározása az arányuk kiszámításához. A kapott pontok átlaga 7,83 volt.

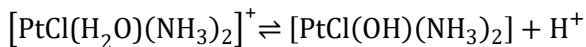
(Csorba Benjámin)

K362. a) A ciszplatinban ($[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$) kloridion és ammóniamolekula ligandumok kötődnek a Pt központi „atomhoz”, így annak töltése +2.

b) A komplex vegyület síknégyszög téralkatú. A ciszplatin az ábrán a bal oldali, és a transzplatin a jobb oldali.



c) Lényegében csak a



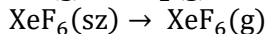
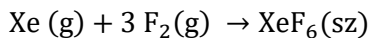
egyensúlyt kell figyelembe venni. A bal oldali komplex koncentrációját jelölje c_1 , a jobb oldaliét c_2 . Ekkor a $K = 2,75 \cdot 10^{-7} = c_2 \cdot [\text{H}^+] / c_1$. Tehát a $[\text{PtCl}(\text{H}_2\text{O})(\text{NH}_3)_2]^+$ és $[\text{PtCl}(\text{OH})(\text{NH}_3)_2]$ koncentrációjának aránya $[\text{H}^+] / K = c_1 / c_2$. Mivel a szervezet pufferrendszere a pH-t közel állandó értéken tartja, így a hidrogénion-koncentrációt állandónak vehetjük. Tehát ebből következik, hogy a vérben a koncentrációarány 0,145, a sejtplazmában pedig 11,5.

Megjegyzés: Mivel a pufferek ismerete nem elvárható tudás, aki ezt figyelmen kívül hagyta, de ettől eltekintve helyesen számolt, megkapta a maximális pontszámot. Aki nem vette figyelembe, hogy az egyes sejtfolyadékok adott hidrogénion-koncentrációval rendelkeznek, az erre a részre nem kapott pontot.

Az átlagpontszám 8,2. Hibátlan megoldást adott Csécsi Marcell és Szabó Márton.

(Borbás Réka)

H321. Először számítsuk ki a fluor-xenon kötés kötésfelszakítási energiáját. Ehhez vegyük figyelembe a következő két reakciót, melyek közül az első a xenon-hexafluorid képződését írja le alapállapotú elemeiből (így ennek a reakciónak a reakcióhője épp a xenon-hexafluorid képződéshője, mivel az alapállapotú elemek képződéshője zérus), a második pedig a szilárd xenon-hexafluorid szublimációját írja le:



Mínthogy az első reakció reakcióhője -338 kJ/mol, a másodiké pedig 59 kJ/mol, így Hess tétele alapján a gáz halmazállapotú xenon-hexafluorid képződését elemeiből e két energiaváltozás összege, azaz -279 kJ/mol kíséri. A reakció végbemeneteléhez 3 fluormolekulában kell egy-egy, tehát összesen 3 fluor-fluor kötésnek felszakadnia (ezeket egyenként 159 kJ/mol energiaváltozás kíséri), míg a xenon-hexafluoridban 6 xenon-fluor kötés jön létre. Jelöljük utóbbit az egyszerűség kedvéért z -vel! Ekkor az előzőek alapján mértékegységektől eltekintve a következő egyenlet írható fel:

$$-279 = 3 \cdot 159 - 6z$$

Innen a z-vel jelölt xenon-fluor kötési energia 126 kJ/mol.

Ezek után már behelyettesíthetjük a xenon-fluor és a xenon-oxigén esetét a feladatban megadott egyenletbe:

$$K(EN_{\text{O}} - EN_{\text{Xe}})^2 = E_{\text{köt}}(\text{Xe} - \text{O}) - \sqrt{E_{\text{köt}}(\text{Xe} - \text{Xe}) \cdot E_{\text{köt}}(\text{O} - \text{O})}$$

$$K(EN_{\text{F}} - EN_{\text{Xe}})^2 = E_{\text{köt}}(\text{Xe} - \text{F}) - \sqrt{E_{\text{köt}}(\text{Xe} - \text{Xe}) \cdot E_{\text{köt}}(\text{F} - \text{F})}$$

Az adatokat behelyettesítve, mértékegységtől eltekintve:

$$96,48(3,44 - EN_{\text{Xe}})^2 = 36,4 - \sqrt{E_{\text{köt}}(\text{Xe} - \text{Xe}) \cdot 210}$$

$$96,48(3,98 - EN_{\text{Xe}})^2 = 126 - \sqrt{E_{\text{köt}}(\text{Xe} - \text{Xe}) \cdot 159}$$

Az egyenletek jobboldalának gyököt nem tartalmazó tagjait kivonva a megfelelő egyenletről, majd a két egyenleteke osztva egymással a xenon-xenon kötési energia kiküszöbölhető az egyenletrendszerből:

$$\frac{96,48(3,44 - EN_{\text{Xe}})^2 - 36,4}{96,48(3,98 - EN_{\text{Xe}})^2 - 126} = \sqrt{\frac{210}{159}}$$

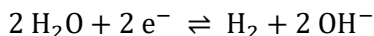
A nevezőkkel szorozva, majd a kapott másodfokú egyenletet 0-ra rendezve, az egyetlen kémiai értelemszerű megoldás (a fluornál kisebb, de 0-nál nagyobb elektronegativitás) 2,85. Tehát az így kapott becsült elektronegativitás a xenonra 2,85.

Megjegyezhető, hogy a xenon-xenon kötési energia az egyenletrendszer alapján igen kicsire, 0,029 kJ/mol értékre adódik. Így tehát jó megoldást kapott az is, aki kémia megfontolásból ezt 0-nak vette és csak az egyenletrendszer egyik egyenletével számolt.

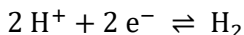
A feladat a versenyzők számára igen könnyűnek bizonyult, sok volt a teljesen helyes megoldás. A kapott pontok átlaga 8,44 volt.

(Csorba Benjámin)

H322. a) Állítsunk össze képzeletben egy olyan galvánelemet, melynek katódjában az elektródreakció egyenlete a következő:



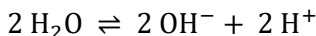
Eközben az anód legyen standard hidrogénelektrod, azaz elektrodreakciójának az egyenlete redukcióra rendezve a következő:



Ismeretes, hogy egy elektrodreakció standardpotenciálja a molekuláris hidrogén szolvatált protonná történő oxidációját magában foglaló cellareakció standardpotenciáljának az értéke, azaz épp ezen galvánelem standard cellareakció-potenciálját kell kiszámítanunk a feladat kérdésének megválaszolásához. Az is ismeretes, hogy a standard cellareakció-potenciál megadható a cellareakció egyensúlyi állandójának segítségével a következő módon:

$$\frac{RT}{zF} \ln K = E_{\text{cell}}^0 = \varepsilon_{\text{katód}}^0 - \varepsilon_{\text{anód}}^0$$

Itt $\varepsilon_{\text{anód}}^0 = 0$, mivel megállapodás szerint a standard hidrogénelektrod elektrodreakció-potenciálja zérus (ez a viszonyítási pont). A képletben R az egyetemes gázállandót jelöli, T a hőmérsékletet, ami esetünkben – minthogy mást nem mond a feladat – 298 K-nek tekinthető, z a töltésszámváltozás, ami esetünkben 2, F pedig a Faraday-állandó, K a bruttó cellareakció egyensúlyi állandója. Utóbbi a következő (az anódreakciót oxidációként vesszük figyelembe):



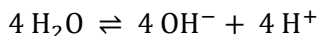
Utóbbi épp a víz autoprotolízisét írja le, így az egyensúlyi állandó a vízionszorzat négyzete (a 2-es sztöchiometriai együtthatók miatt), azaz $K = (10^{-14})^2$. Így már a fentebb felírt egyenlet segítségével a katódreakció standard elektrodreakció-potenciálját kiszámíthatjuk:

$$\varepsilon_{\text{katód}}^0 = E_{\text{cell}}^0 = \frac{RT}{zF} \ln K = \frac{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298 \text{ K}}{2 \cdot 96500 \frac{\text{C}}{\text{mol}}} \ln 10^{-28} = -0,828 \text{ V}$$

Tehát a számításhoz a vízionszoratra mint egyensúlyi állandóra volt szükség, a kért elektrodreakció standard elektrodreakció-potenciálja pedig $-0,828 \text{ V}$.

b) A feladatot az előzőhöz hasonlóan oldjuk meg. Állítsunk össze gondolatban egy olyan galvánelemet, amelynek katódreakciója épp a kért reakció, míg anódreakciója a feladatban megadott, $1,23 \text{ V}$

standard elektródreakció-potenciálú reakció. Ekkor a bruttó cellareakció:



Ez ismét a víz autoprotolízisét írja le. Így a standard cellareakció-potenciálra az előző feladatrészhez hasonlóan felírható:

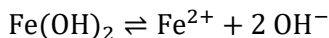
$$\frac{RT}{z'F} \ln K' = E_{\text{cell}}^0 = \varepsilon_{\text{katód}}^0 - \varepsilon_{\text{anód}}^0$$

A képletben ezúttal a z' töltésszám-változás 4, a K' egyensúlyi állandó a vízionszorzat 4. hatványa, $\varepsilon_{\text{anód}}^0 = 1,23 \text{ V}$ a feladat alapján, $\varepsilon_{\text{katód}}^0$ pedig a kért reakció standard elektródreakció-potenciálja (a többi jelölés azonos az eddigivel). Az egyenletet átrendezve:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{katód}}^0 &= \frac{RT}{z'F} \ln K' + \varepsilon_{\text{anód}}^0 = \frac{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298 \text{ K}}{4 \cdot 96500 \frac{\text{C}}{\text{mol}}} \ln 10^{-56} + 1,23 \text{ V} = \\ &= -0,828 \text{ V} + 1,23 \text{ V} = 0,402 \text{ V} \end{aligned}$$

Így tehát a kért reakció standard elektródreakció-potenciálja 0,402 V.

c) Ezúttal állítsunk össze gondolatban egy olyan galvánelemet, amelynek katódjának elektródreakciója az ezen feladatrészhez megadott első reakció, anódreakciója pedig a megadott második reakció az ellentétes irányba lejátszódva. Ekkor a bruttó cellareakció éppen a következő:



Azaz a megadott két reakciót a vas(II)-hidroxid L oldhatósági szorzata mint egyensúlyi állandó köti össze. Az előbbiekhöz hasonló módszerrel ez is könnyedén kiszámítható, ha felírjuk kétféleképpen a reakció standard cellareakció-potenciálját:

$$\frac{RT}{zF} \ln L = E_{\text{cell}}^0 = \varepsilon_{\text{katód}}^0 - \varepsilon_{\text{anód}}^0$$

A képletbeli jelölések az eddigiekhez hasonlóak. L kifejezése, és behelyettesítés után az oldhatósági szorzatra $6 \cdot 10^{-16}$ adódik.

d) Állítsuk össze először gondolatban azt a cellát, melynek katódjában az ehhez a feladatrészhez megadott első reakció, anódjában a második reakció játszódik le (a megfelelő irányban). Ez után állítsuk össze gondolatban azt a cellát, melynek katódjában az ehhez feladatrészhez megadott harmadik reakció, anódjában a második reakció játszódik le (a megfelelő irányban). Ekkor az eddigiekkel teljesen azonos megfontolással (ezúttal már nem részletezve) a következő két egyenlet írható fel (ε_i^0 az ehhez a feladatrészhez megadott i -edik elektródreakció standard elektródreakció-potenciálja):

$$\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 = \frac{RT}{zF} \ln \frac{[\text{Fe}^{3+}]^2}{[\text{Fe}^{2+}]^3} = \frac{RT}{zF} \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{[\text{Fe}^{3+}]^4}{[\text{Fe}^{2+}]^6}$$

$$\varepsilon_3^0 - \varepsilon_2^0 = \frac{RT}{zF} \ln \frac{[\text{Fe}^{2+}]^6}{[\text{Fe}^{3+}]^4} = -\frac{RT}{zF} \ln \frac{[\text{Fe}^{3+}]^4}{[\text{Fe}^{2+}]^6}$$

Az egyenletrendezés során felhasználtuk a logaritmus azonosságait. Az itt lévő első egyenlet 2-szeresét a második egyenlettel összeadva:

$$2(\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0) + \varepsilon_3^0 - \varepsilon_2^0 = 0$$

Innen:

$$\varepsilon_3^0 = 3\varepsilon_2^0 - 2\varepsilon_1^0$$

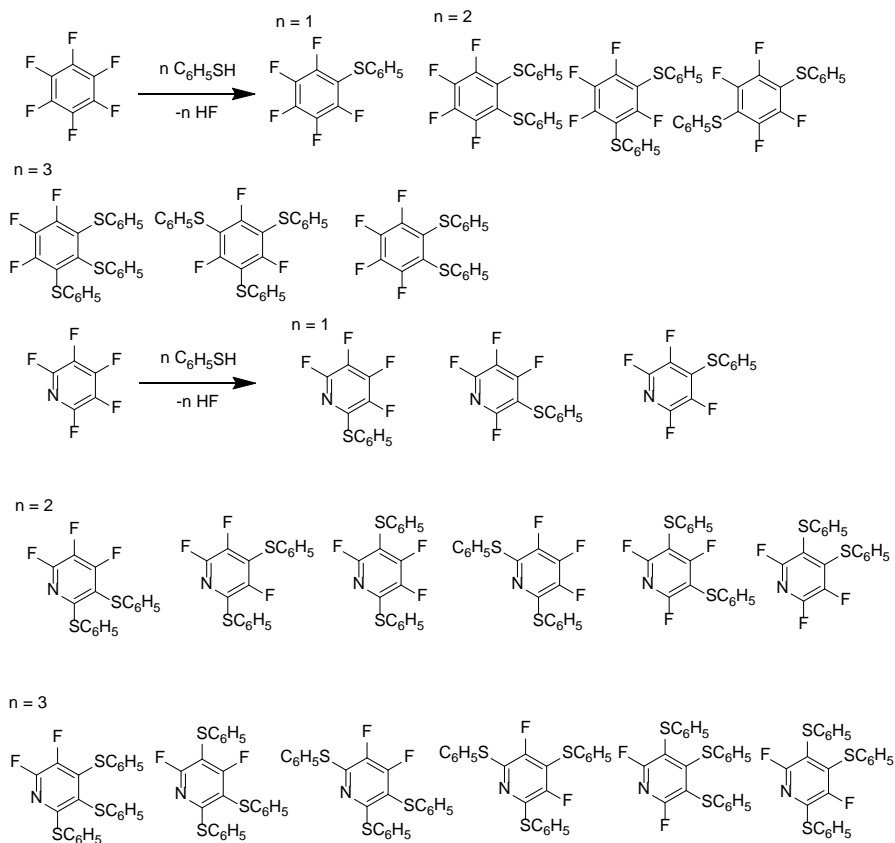
Ez tehát a felfedezhető összefüggés a három reakció standard elektródreakció-potenciálja között.

A feladat a versenyzők számára igen nehéznek bizonyult, hibátlan megoldás nem is érkezett. Megállapítható, hogy sokan sajnos tévesen alkalmazzák az elektrokémiai fogalmakat. Ezzel kapcsolatban művelődni például Dr. Láng Győző egyetemi jegyzetéből lehet. A kapott pontok átlaga mindössze 5,30 volt.

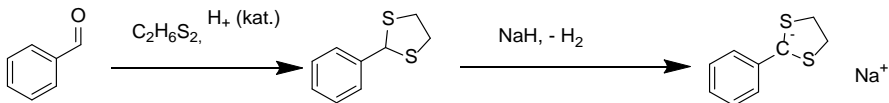
(Csorba Benjámin)

H323. a) A reakció során a fluoridok egymás után tiofenil-részletekre cserélődnek le. A lehetséges termékek száma:

Tiofenol csoportok száma	1	2	3
Hexafluorobenzollal	1	3	3
Pentafluoropiridinnel	3	6	6



b) Az A vegyület az etán-1,2-ditol, melynek égési egyenlete a következő:



A feladat nem volt nehéz, de többen nem, vagy csak hiányosan írták fel a reakcióegyenleteket.

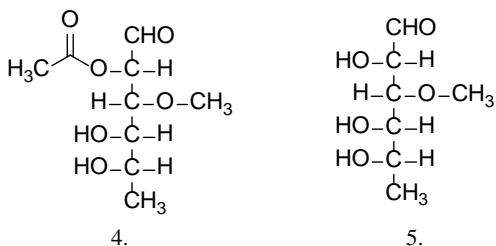
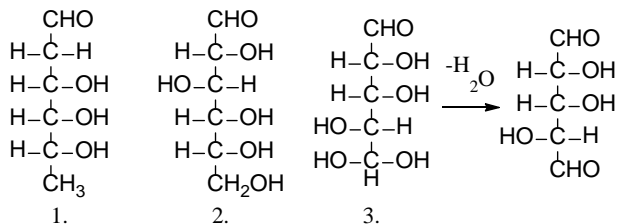
(Forman Ferenc)

H324. a) A digitoxin molekulájában megtalálható 3 monoszacharid azonos, szerkezetét az 1. számmal jelölt molekula ábrázolja. Hétköznapi neve: D-digitoxóz, szabályos neve: 2,6-didezoxi-D-ribohexóz.

b) A digitoxin nem redukáló hatású cukorszármazék, mert az összes glikozidos hidroxilcsoportja kötésben vesz részt.

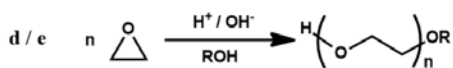
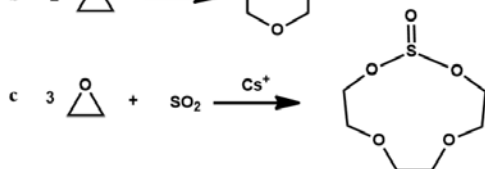
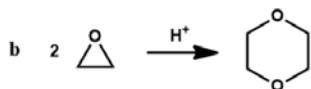
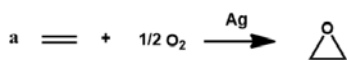
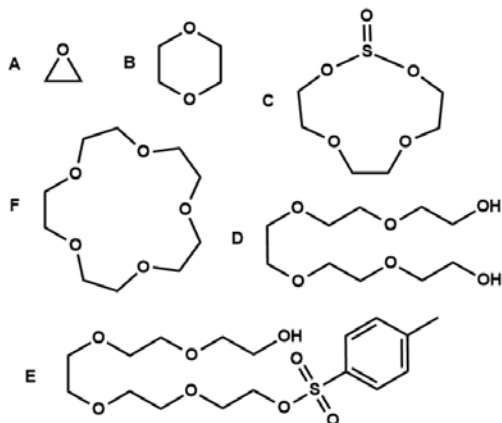
c) Az **A** molekulában két különböző monoszacharid található meg, a 2-es számmal jelölt D-glükóz és a 3-as számmal jelölt 5-hidroxi-L-lixóz (ez egy geminális diol, vízvesztéssel tovább alakul aldehiddé). Tehát az **A** molekula a D-glükózból és L-lixózból származtatható. A **B** molekulában 2-acetil-6-dezoxi-3-O-metil-L-glükóz található meg, amit a 4. molekula ábrázol, tehát az az L-glükózból származtatható. A **C** molekulában a három monoszacharid közül kettő azonos, D-glükóz, a harmadik pedig a 6-dezoxi-3-O-metil-L-glükóz, amit az 5. molekula ábrázol. Tehát a **C** molekula a D-glükózból és L-glükózból származtatható.

Ezek közül szokatlan az L-lixóz és az L-glükóz, mivel ezek L konfigurációjúak, ami a természetben ritkán fordul elő.

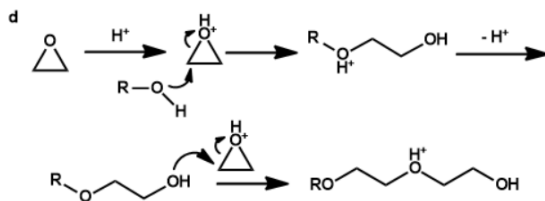


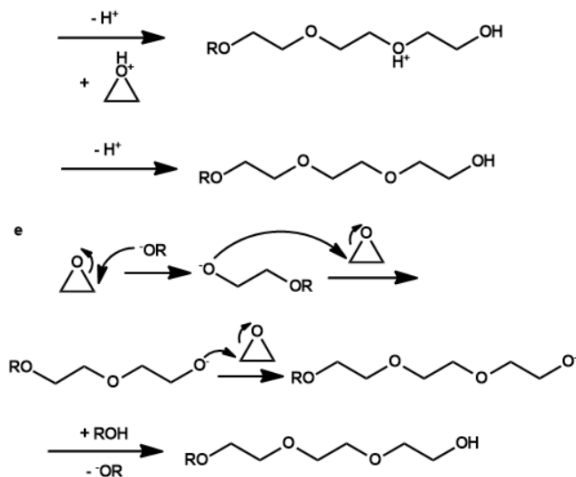
(Bacsó Zsófia Réka)

H325. a) A keresett szerkezetek és a reakciók egyszerűsített egyenletei:



b) A **d** és **e** reakció mechanizmusa:

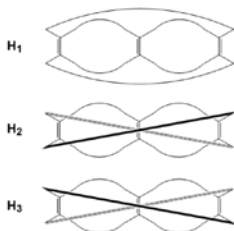




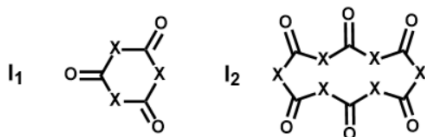
c) A két koronaéter (illetve ahhoz hasonló) molekula előállítása során a jelenlévő alkálifém kationok „maguk köré” koordinálják az első lépésekben képződő kisebb poliéter-részleteket, így elősegítve a kívánt termékek képződését teljes polimerek helyett. Ezt nevezik tág templát-effektusnak. A NaH bázis használata az **F** vegyület előállításakor azért előnyös, mert már önmagában tartalmazza a szükséges fémiont is a szerves bázisokkal szemben. Utóbbi alkalmazása esetén valamilyen plusz fémsót kellene még a rendszerbe vinni a kívánt reakció eléréséhez.

d) A bázis hatására a szabad hidroxi-végek szubsztituálják a tozilcsoportot tartalmazókat, az így kialakuló gyűrű lehet a „hagyományos” változat (**H₁**), de ez a rendszer már képes Möbius-szalagszerűen megcsavarodni és kialakítani **H₂** és **H₃** szerkezeteket is. **H₁** és a csavart szerkezet egymás topológiai izomerei (topoizomerek), a csavarton belül **H₂** és **H₃** egymás enantiomerei.

A szerkezetek sematikus ábrái:



A felrajzolt szerkezetek ozonolízisekor **H**₁-ből két gyűrű kiválásával kapunk 2 ekvivalens **I**₁-et, **H**₂ és **H**₃-ból pedig 1 ekvivalens **I**₂-t, a kiralitás elvész. Ezek szerkezetei (X = -CH₂O(CH₂CH₂O)₂CH₂-):



Az esetleg képződő nagyobb gyűrűket, polimereket, illetve félig reagált molekulákat nem vizsgálták, kis mennyiségben persze nem kizárt a keletkezésük.

A kén-dioxid beépülésével létrejövő koronaétert leíró cikk:

H. W. Roesky; H. G. Schmidt; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **24**, 8, p. 695 (1985)

A molekuláris Möbius-szalag előállításáról szóló cikk:

D. M. Walba; R. M. Richards; R. C. Haltiwanger; *J. Am. Chem. Soc.*, 104, 11, p. 3219-3221 (1982)

Hasznos tanács lehet, hogy mechanizmust nem lehet szóban leírni, azt mindenképp rajzolni kell. Ezen felül rajzolása közben: igen ritkák a köztes szerkezetekben a primer karbokationok, valamint ilyen egyszerű körülmények közt a trialkil-oxóniumionok is, ezek feltételezése visszatérő hiba volt. Középiskolában ritka az ilyen feladat, de érdemes utánaolvasni, milyen módon és célból szokták az ilyeneket felvázolni összetettebb reakciónál. Az alap szerkezetek és reakciók kitalálása nem bizonyult nehéznek. Az utolsó feladatrészen többen nem gondoltak a termékek kiralitására, ezt a lehetőséget érdemes mindig megvizsgálni. A legjobb megoldást Simon Vivien Klaudia és Debreczeni Dorina küldte be, gratulálunk nekik!

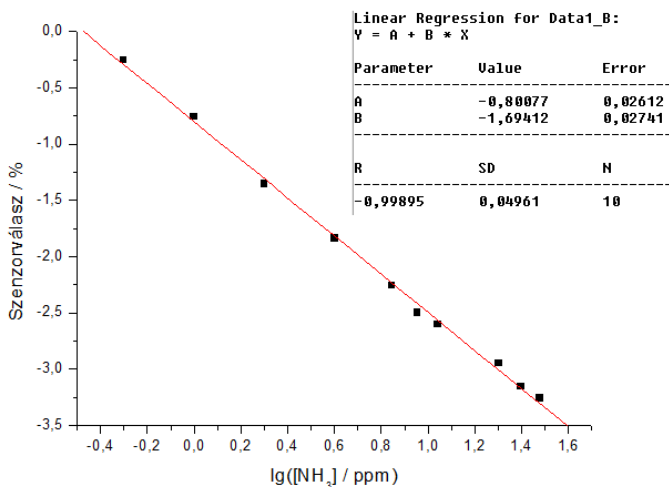
(Szobota András)

H326. A feladatban látható ábrát szemlélve könnyedén észrevehető, hogy a vízszintes tengely beosztása eltér a megszokott, lineáris beosztástól: ez a skála logaritmikusan van felvéve. Ez alapján egyértelmű, hogy nem a szenzor válasza és maga az ammónia-koncentráció (ppm-ben) között van lineáris összefüggés, hanem a szenzorválasz és az ammónia koncentrációjának logaritmusosa közt. Az,

hogy milyen alapú logaritmust használunk, teljesen mindegy, mivel a logaritmus azonosságai alapján (lásd „áttérés új alapra”) ezek konstansszorosai egymásnak. Itt a megoldásban az egyszerűség kedvéért 10-es alapú logaritmussal számolok, mivel a legtöbb versenyző ezt használta (a többiek természetes alapú logaritmust használtak, vagy rosszul oldották meg a feladatot). Ehhez először számítsuk ki a megadott ammóniakoncentrációk 10-es alapú logaritmusát:

$[\text{NH}_3] / \text{ppm}$	$\lg([\text{NH}_3] / \text{ppm})$
0,500	-0,301
1,00	0,000
2,00	0,301
4,00	0,602
7,00	0,845
9,00	0,954
11,0	1,041
20,0	1,301
25,0	1,398
30,0	1,477

Most már ábrázolhatjuk az ammóniakoncentráció logaritmusának függvényében a szenzorválaszt, és egyenest illeszthetünk ezekre az adatpontokra. Ez látható a következő ábrán.



Látható, hogy az egyenes paramétereinek relatív hibája kicsi, 4 % alatti mindkét paraméter esetén, illetve, hogy az egyenes R^2 jósági foka 0,9979, tehát a közelítés jó (az illesztés annál pontosabb, minél közelebb van a jósági fok 1-hez).

Ez alapján az ammóniakoncentráció és a szenzorválasz közti összefüggés (y a szenzorválasz %-ban, x az ammóniakoncentráció ppm-ben):

$$y = -0,80077 - 1,69412 \lg x$$

Innen x -et kifejezve, majd y helyére a kért $-3,812$ értéket helyettesítve:

$$x = 10^{\frac{y+0,80077}{-1,69412}} = 10^{\frac{-3,812+0,80077}{-1,69412}} = 59,9$$

Ez alapján, feltételezve, hogy az extrapolációval kapott eredmény helyes (azaz a 0,5 ppm és 30 ppm közti adatpontokra illesztett függvény jó közelítéssel helyes eredményt adhat ezen a tartományon kívül is), a keresett ammóniakoncentráció 59,9 ppm.

Megjegyzés: A különböző egyenesillesztő programok (Origin, Excel) a legkisebb négyzetek módszerének segítségével határozzák meg az egyenes együtthatóit. A legkisebb négyzetek módszerének alkalmazásakor az egyenes olyan paramétereit (m meredekség, b függőleges tengelymetszet) keressük, amelyek mellett a következő kifejezés minimális:

$$Q(m, b) = \sum_{i=1}^{10} [(m \lg x_i + b) - y_i]^2$$

A kifejezésben $\lg x_i$ az i -edik mérés független változója (esetünkben az ammóniakoncentráció logaritmus), y_i pedig a függő változó (esetünkben a szenzorválasz). Tehát az egyenes azon paramétereit keressük, melyek esetén az illesztés alkalmazásával kapott közelítő érték, és a mért érték különbségeinek négyzetösszege minimális. Ezért hívjuk a módszert a legkisebb négyzetek módszerének. Ha a $Q(m, b)$ kétváltozós függvény adott paraméterek mellett minimális, akkor ott a függvény parciális deriváltjainak értéke zérus, azaz:

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{\partial Q}{\partial m} = 2 \sum_{i=1}^{10} [(m \lg x_i + b - y_i) \cdot \lg x] = \\
 &= 2 \cdot \left(m \sum_{i=1}^{10} \lg^2 x_i + b \sum_{i=1}^{10} \lg x_i - \sum_{i=1}^{10} (\lg(x_i) y_i) \right) \\
 0 &= \frac{\partial Q}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^{10} (m \lg x_i + b - y_i) = 2 \cdot \left(m \sum_{i=1}^{10} \lg x_i + 10b - \sum_{i=1}^{10} y_i \right)
 \end{aligned}$$

Behelyettesítve a megfelelő adatpárokat, elvégezve az összegzéseket és egyéb egyszerűsítéseket, a következő egyenletrendszer adódik:

$$\begin{cases} 9,082m + 7,619b + 21,487 = 0 \\ 7,619m + 10b + 20,915 = 0 \end{cases}$$

Ezt megoldva a megoldásban közölt együtthatókat kapjuk. (Ez a levezetés is, és az ábrázolás is teljes értékű megoldásként lett elfogadva. Ha valaki csak két adatpont alapján számolta ki a paramétereket, az pontatlan, nem teljes értékű megoldás.)

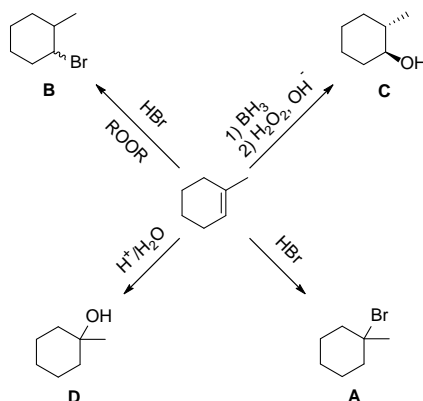
A feladat viszonylag könnyűnek bizonyult, több teljes pontszámú megoldás is érkezett. Ezeket Csécsi Marcell, Debreczeni Dorina, Ficsór István Dávid és Sajósi Benedek küldték. Csécsi Marcell egyenleteit kis igazítás után a Megjegyzés rovatba is átvettem. Az átlagpontszám 6,53 pont volt.

(Csorba Benjámin)

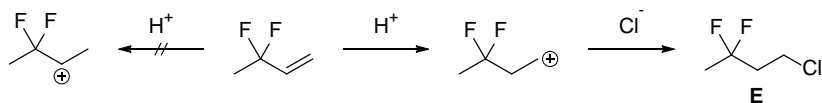
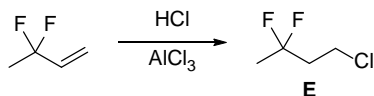
H327. a) Az **A–D** vegyületek mindannyian 1-metilciklohex-1-énből keletkeznek különböző addíciós reakciók főtermékeként. Az alábbi táblázatban összefoglaltuk az ekkor lejátszódó folyamatok jellemzőit.

#	Főtermék	Regioszelektivitás	Sztereoszelektivitás
1	A	Markovnyikov	nincs
2	B	<i>anti</i> -Markovnyikov	nincs
3	C	<i>anti</i> -Markovnyikov	szin-addíció
4	D	Markovnyikov	nincs

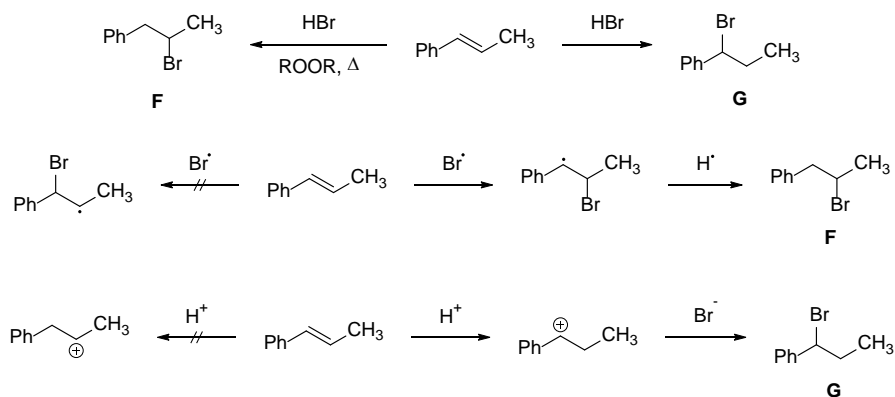
A Markovnyikov-termékek (**A** és **D**) akirálisak, míg az *anti*-Markovnyikov-termékek (**B** és **C**) királisak. Ebből adódóan **A** és **D** egy-egy szerkezetet jelöl. A **2** gyökös mechanizmusú HBr-addíció esetén a sztereoselektivitás hiánya miatt 2-féle szerkezetű molekula tud képződni (az optikai izomériát is figyelembe véve összesen 4), a hidroboráláskor (**3** reakció) pedig a sztereoselektív addíció miatt csak 1-féle (optikai izomériával is számolva összesen 2). A főtermékek szerkezetét a sztereokémiájuk feltüntetésével a következő ábrán mutatjuk be.



A 3,3-difluorbut-1-én HCl-addíciójakor létrejönni képes két karbokation közül a primer a stabilabb, ugyanis a két fluoratom negatív indukzív ($-I$) effektusa, elektronvonzó tulajdonsága révén annál kevésbé destabilizálja a karbéniumiont, minél messzebb helyezkedik el tőle a pozitív töltés. Ennek megfelelően a primer karbokationon keresztül játszódik le a reakció és az előbb ismertetett elektronikus okok miatt az *anti*-Markovnyikov-termék (**E**) keletkezik főtermékként.



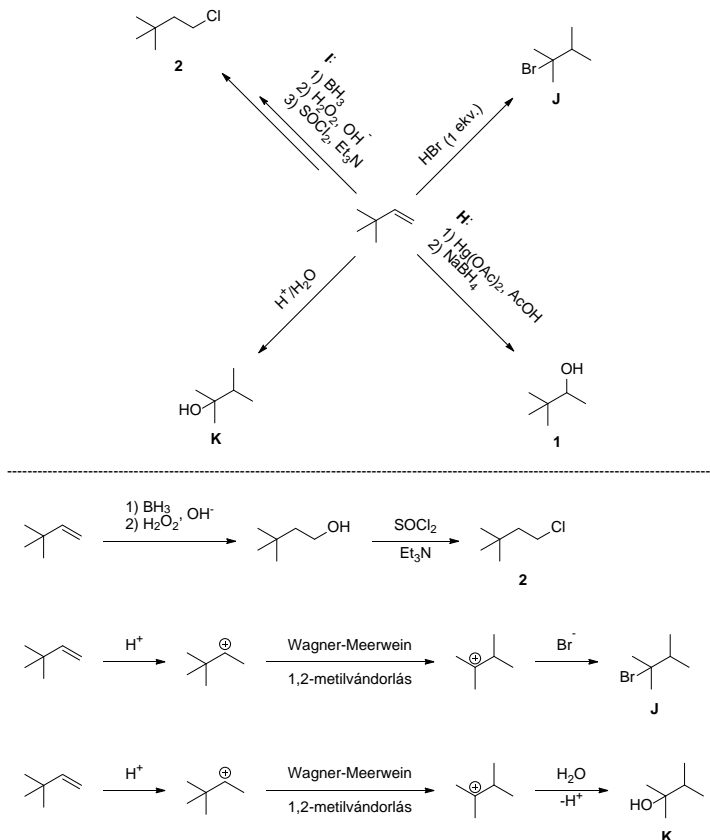
Az **F** főterméket eredményező HBr-addíció gyökös, míg a **G** képződésével járó folyamat ionos mechanizmus szerint játszódik le. Mind a gyök, mind a karbokation esetében a két-két lehetségesen létrejövő részecske közül az a stabilabb, amelyikben a párosítatlan elektron, illetőleg a pozitív töltés azon a szénatomon található, amelyikhez a fenilcsoporthoz kapcsolódik, hiszen a gyököt és a karbéniumiont egyaránt a metilcsoporthoz viszonyítva nagyobb pozitív induktív (+I) effektussal, elektronküldő tulajdonsággal rendelkező fenilcsoport jobban képes stabilizálni. Ezzel és a mechanizmussal egybehangzóan jutunk az alábbi ábrán bemutatott **F** és **G** főtermékhez.



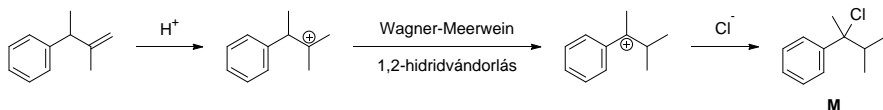
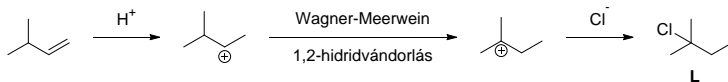
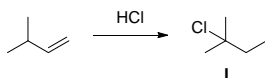
b) A 3,3-dimetilbut-1-én HBr-addíciója, valamint savkatalizált vízaddíciója az előző feladatrészben ismertetettekhez hasonlóan ionos mechanizmus szerint játszódik le, amelynek első lépésében a molekula protonálódásával mindkét esetben ugyanaz a szekunder karbokation jön létre. Ez a köztitermék azonban oly módon stabilizálódik, hogy a pozitív töltéssel szomszédos szénatomról egy metilcsoport átvándorol, létrehozva ezáltal a stabilabb tercier karbéniumiont. A folyamatot 1,2-metilvándorlásnak nevezik, amely a Wagner–Meerwein-átrendeződés egyik lehetséges megnyilvánulási formája.

Az **1** és **2** vegyületek szerkezetéből szembeűnik, hogy azok Wagner–Meerwein-átrendeződés nélküli átalakulásokban keletkeznek. Ahhoz, hogy elkerüljük a nemkívánatos átrendeződést, olyan reagenseket kell választanunk, amelyek nem kationos jellegű köztiterméken keresztül

lezajló reakciót idéznek elő az alkénen. Az **1** szekunder alkohol egy Markovnyikov-szabálynak megfelelő formális vízaddícióval képződött, ami pl. oxi- és az azt követő demerkurálással valósítható meg a Wagner-Meerwein-átrendeződés bekövetkezése nélkül. A **2** klórozott szénhidrogén egy *anti*-Markovnyikov-szabálynak megfelelő formális HCl-addíciós reakcióval állítható elő. Fontos megjegyezni, hogy a HCl esetében nem zajlik le a fentiekben már előkerült, szerves peroxid jelenlétében végbemenő gyökös mechanizmusú hidrogén-halogenid-addíció, ezért – ahogyan arra a dupla nyíl utal is – többlépéses szintézist szükséges alkalmazni. Ennek egyik megoldási lehetősége a hidrobórást követő halogénezési (klórozási) reakció tionil-kloriddal szerves bázis (pl. trietil-amin) jelenlétében, amelynek során a primer alkohol OH csoportját Cl-atomra cseréljük le.

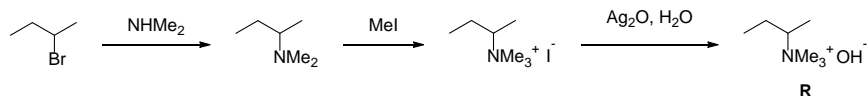
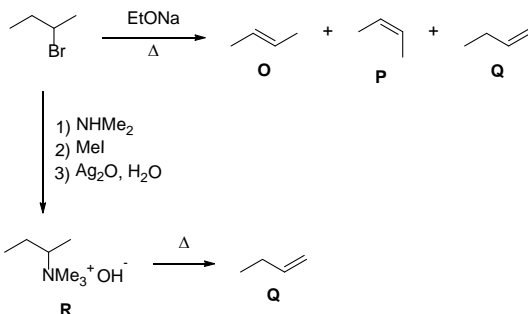


Az **L** és **M** vegyületek keletkezésekor szintén lényeges szerepet játszik a Wagner–Meerwein-átrendeződés, viszont ekkor a karbokation nem metilcsoport, hanem egy hidrogénatom vándorlásával stabilizálódik, mert ellenben az 1,2-hidridvándorlással, az alkilcsoport átrendeződése nem jár energetikailag kedvezőbb szerkezet létrejöttével. Az **L** klórozott szénhidrogén példájában az átrendeződés folytán magasabb rendű karbéniumion jön létre (szekunderből tercier), míg az **M** aromás klórszármazék esetén ugyan nem történik rendűségbeli változás (tercier marad), viszont a pozitív töltés áthelyeződésével stabilabb karbokation alakul ki a fenilcsoport az a) feladatrészen már említett elektronküldő hatása miatt.



c) 2-brómbutánt nátrium-etoxid kis térigényű nukleofil bázissal hevítve a Zajcev-szabálynak megfelelő főtermékek képződnek, ami a but-2-én cisz- és transz-izomerét (**O** és **P**) jelenti. Az elimináció mellékterméke a Hofmann-szabály alapján keletkező but-1-én (**Q**). A másik reakcióút a Hofmann-elimináció folyamatát mutatja be, amelynek körülményei között a Hofmann-termék, vagyis a but-1-én (**Q**) a főtermék. Ennek első lépésében alifás nukleofil szubsztitúciós reakcióban a dimetil-amin tercier amint hoz létre, amelyet metil-jodiddal metilezve kvaterner ammónium-jodid sóhoz jutunk. Ez Ag_2O és H_2O jelenlétében, AgI csapadék leválása mellett kvaterner ammónium-hidroxid sóvá alakul, amelynek a zsúfolt térbeli

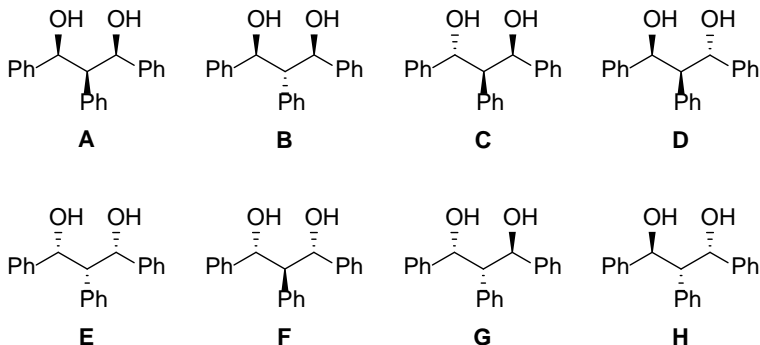
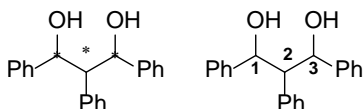
elrendeződése miatt hevítés hatására trimetil-amin és víz kilépésével a Hofmann-termék keletkezik.



A példa sajnos szinte minden versenyzőt alaposan megréft, ugyanis a beküldők többsége egyáltalán nem vette figyelembe a Wagner-Meerwein-átrendeződés bekövetkeztét. Ezenkívül a megoldók regio-szelektivitási szabályokkal és a karbokationok stabilitásával kapcsolatos ismeretei is hagytak kívánnivalót maguk után. Egy hibátlan, teljes értékű megoldás sem született, kiemelkedő volt azonban Benkő Dávid dolgozata. Átlagpontszám: 3,88 pont.

(Baglyas Márton)

H328. Mivel az 1,2,3-trifenilpropán-1,3-diol molekulája első közelítésben három kiralitáscentrumot tartalmaz, ezért összesen $2^3 = 8$ lehetséges sztereoizomere létezik, hiszen minden egyes aszimmetriacentrum körül kétféle konfiguráció alakulhat ki. Ezeknek (A–H) a szerkezetét az alábbi ábrán mutatjuk be.



Amennyiben az adott szerkezetben az 1-es és a 3-as jelzésű szénatomhoz kapcsolódó OH csoport térállása megegyezik, akkor a vizsgált molekula rendelkezik belső tükörsíkkal, emiatt akirális. Erről van szó az **A**, **B**, **E** és **F** esetében. A többi négy izomer (**C**, **D**, **G** és **H**), amelyben eltérő az 1-essel és a 3-assal jelölt szénatomhoz kapcsolódó OH csoport térállása, királis, ugyanis ezeknek a molekuláknak nincsen belső tükörsíkja.

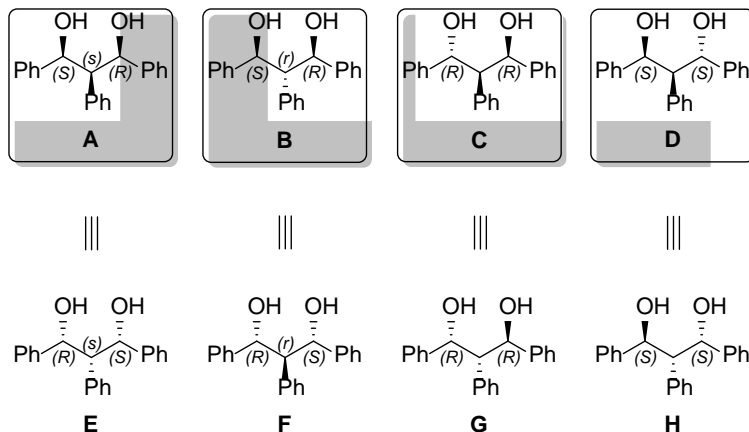
Ügyelni kell azonban arra, hogy az **A–E** és **B–F** izomerek páronként azonosak, mert a belső tükörsíkjuknak köszönhetően akirálisak, aminek következtében a tükörképi párjukkal fedésbe hozhatók (mezo vegyületek). Ezekben a szerkezetekben a 2-essel jelzett szénatom ún. pszeudo-aszimmetriacentrum. Szintúgy páronként azonos molekulák alkotják a **C–G** és **D–H** izomerpárokat, ugyanis ezen négy szerkezet esetén a 2-essel jelölt szénatom valójában nem kiralitáscentrum. Ennélfogva hiába változtatjuk meg a 2-es jelzésű szénatomhoz kapcsolódó fenilcsoport térállását, ekvivalens, vagyis egymásba átvihető térszerkezethez jutunk ekkor.

Az előzőket összefoglalva, a következő mondható el.

Akirális: **A**, **B** (és **E**, **F**)

Királis: **C**, **D** (és **G**, **H**)

Tehát a 8 lehetséges sztereoiszomer között mindösszesen 4 különböző található: 2 mezo vegyület – **A** és **B**, valamint egy enantiomerpár – **C** és **D**. Ezeket az eltérő molekulákat az alábbi áttekintő ábrán bekeretezéssel jelöltük.



A királis izomerek optikailag aktívak, közöttük az eltérő (fajlagos) optikai forgatóképességük alapján lehet különbséget tenni, azaz, hogy milyen mértékben és irányban forgatják el a síkban (lineárisan) polarizált fény rezgési polarizációs síkját.

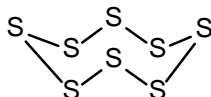
Jelen példában a **C** és **D** enantiomert kellett megkülönböztetni egymástól. Ilyenkor a két, egymással enantiomer viszonyban álló molekulára meghatározott fajlagos optikai forgatóképesség egymás ellentettje, ami annak köszönhető, hogy az enantiomerek a síkban polarizált fény polarizációs síkját ugyanolyan mértékben forgatják el, csak ellentétes irányban – egyik balra, míg a másik jobbra. Mivel egyéb fizikai tulajdonságaik (olvadáspont, forráspont, törésmutató, dipólusmomentum stb.) megegyeznek, ebből kifolyólag azokat nem lehet segítségül hívni a megkülönböztetésükben.

A feladat a beküldők többségének alapvetően nem okozott nagyobb gondot, főként csak apróbb figyelmetlenségi hibák csúsztak be. Azonban visszatérő hibaként fordult elő a megoldásokban, hogy az azonos izomereket különbözőnek tekintették, illetve néhány megoldón kifogott a molekulák királis, akirális voltának a megállapítása is. Öt hibátlan, teljes értékű megoldás született, amelyeket Debreczeni Dorina, Ficsór István

Dávid, Nguyen Bich Diep, Sajósi Benedek és Yokota Adan küldött be.
 Átlagpontszám: 8,48 pont.

(Baglyas Márton)

H329. a) A kénmolekula térszerkezete:

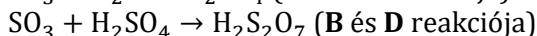
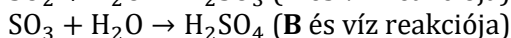
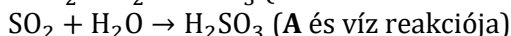
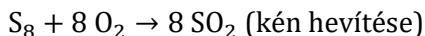


A molekula tükörsíkjai azok a síkok, amelyek a molekula minden második atomja által meghatározott síkra merőlegesek és két szemközti kénatomon haladnak át. Az S_8 molekula tehát 4 tükörsíkot tartalmaz.

b) Az **A-E** betűk az alábbi vegyületeket jelentik:

A: SO_2	B: SO_3	C: H_2SO_3	D: H_2SO_4	E: $H_2S_2O_7$

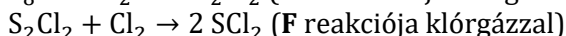
A szövegben említett reakciók egyenletei:

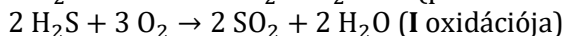
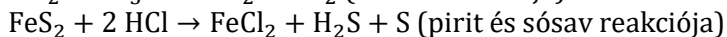
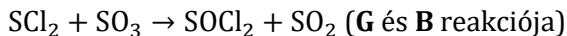


c) Az **F-I** betűk a következő vegyületeket jelentik:

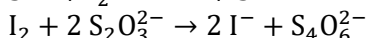
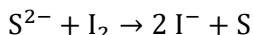
F: S_2Cl_2	G: SCl_2	H: $SOCl_2$	I: H_2S

A megemlített reakciók egyenletei:





d) A gyógyvízminta vizsgálata során a kénhidrogént jóddal oxidálták, majd a jódfelesleg mennyiségét visszatitrálással határozták meg. A lejátszódó reakciók a következők voltak:



Az összes jód mennyisége $12,5 \text{ cm}^3 \cdot 0,030 \text{ M} = 0,375 \text{ mmol}$ volt. A visszamaradt jód titrálása során $9,56 \text{ cm}^3$ $0,0500 \text{ M}$ -os tioszulfát mérőoldat fogyott, amiben $0,478 \text{ mmol}$ tioszulfát volt. Ez feleannyi, azaz $0,239 \text{ mmol}$ jóddal egyenértékű. A többi jód ($0,136 \text{ mmol}$) a gyógyvíz H_2S -tartalmára fogyott. Tehát az 500 ml (azaz 500 g) minta $0,136 \text{ mmol}$ kénhidrogént tartalmazott.

$$c = \frac{0,136 \text{ mmol} \cdot 34 \text{ g/mol}}{0,5 \text{ kg}} = 9,25 \text{ mg/kg} = 9,25 \text{ ppm}$$

A legtöbb beküldőnek az F vegyület kitalálása okozott gondot, néhányan pedig a számolás során vétettek hibát. Az egyetlen hibátlan megoldást Debreczeni Dorina küldte be.

(Balbisi Mirjam)

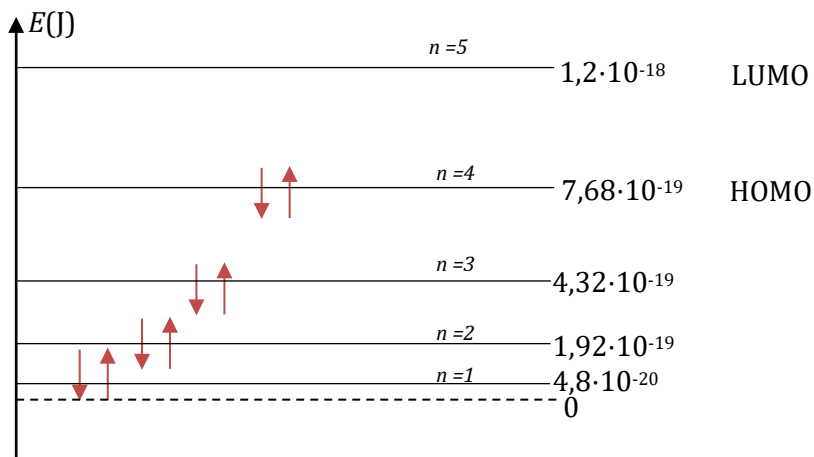
H330. a) Az 1,3,5,7-oktatetraén egy nyílt láncú konjugált polién, amelyben 8 db π elektron található. Egy ilyen rendszer leírását egydimenziós dobozba zárt részecske közelítéssel is megtehetjük, ebben az esetben az alkalmazott egy dimenziós doboz hossza:

$$L = 8 \cdot 1,40 \text{ \AA} = 8,32 \text{ \AA}$$

A Pauli-elv értelmében minden molekulapályán maximum két elektron helyezkedhet el és nincsen semmilyen olyan ok, ami miatt azonos energiájú molekulapályák lehetnének. Így a főkvantumszámokat használva a megfelelő energia képlet alkalmazásával megszerkeszthető az energiadiagram. Sajnos itt hiba csúszott a feladat kiírásába, ugyanis az energiaképlet helyesen a következőképpen néz ki:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

Az energiaszintek $n=5$ -ig ábrázolva és $n=4$ -ig betöltve, a megfelelő energia értékek feltüntetésével a következőképpen néz ki (Sajósi Benedek ábrájának felhasználásával):



Az elektronok összenergiája a következőképpen számítható:

$$E_{\text{össz}} = 2(E_1 + E_2 + E_3 + E_4) = 2,8817 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

b) A HOMO, a legmagasabb energiájú betöltött pálya az $n = 4$ lesz, míg a legalacsonyabb betöltetlen pályája, a LUMO az $n = 5$ lesz.

A HOMO-ról LUMO-ra történő gerjesztéshez szükséges fény hullámhossza a következőképpen számítható:

$$\lambda = \frac{hc}{(E_5 - E_4)} = 459,55 \text{ nm}$$

A feladat könnyűnek bizonyult, a beküldők többségének jól sikerült a megoldása. A legtöbb hiba abból adódott, hogy gyűrűs vegyületnek tételezték fel az oktatetraént, illetve a legtöbb esetben elmaradt az összenergia kiszámítása.

(Varga Szilárd)