

Záróvizsga tételek
Vegyész MSc szak
Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar

Megjegyzés: a vizsgázó a négy témakör közül két, véletlenszerűen kiválasztott témakörből húz 1-1 tételt.

A részletezés azokat a kérdésköröket tartalmazza, amelyek lényegre törő kifejtése elvárt a hallgatótól. A vizsga alkalmával további kérdések is felmerülhetnek.

1. TÉMAKÖR:
SZERVETLEN KÉMIA ZÁRÓVIZSGA TÉTELEK

- 1. Jellemezze az alkáli- és alkáliföldfémek fontosabb szervesetlen vegyületeit, elemorganikus származékait és bioszervesetlen kémiai szempontból jelentős komplexeit!** *(hidridek, halogenidek, oxigéntartalmú származékok, koronaéterekkel és kriptandokkal képezett komplexek, biológiai fontosságú többfogú ligandumokkal képezett komplexek, alkálifém-organikus és alkáliföldfém-organikus vegyületek és szintetikus alkalmazásai)*
- 2. Jellemezze a bór és az alumínium fontosabb szervesetlen vegyületeit, elemorganikus származékait!** *(hidridek, halogenidek, oxigéntartalmú származékok, bórorganikus vegyületek és szintetikus alkalmazásai, alumínium-organikus vegyületek szintézise és gyakorlati alkalmazása)*
- 3. Jellemezze a szilícium, az ón és az ólom fontosabb szervesetlen vegyületeit, elemorganikus származékait!** *(hidridek, halogenidek, oxigéntartalmú származékok, szilikátok, gyakorlati fontosságú szilícium-organikus származékok, ónorganikus származékok szintézise és alkalmazása katalitikus szintézisekben, ólomorganikus származékok, az ólom megkötődése biológiai rendszerekben)*
- 4. Jellemezze a nitrogén, a foszfor és az arzén oxigéntartalmú vegyületeit! Milyen módon történik a nitrogén és a foszfor biológiai rendszerekbe történő beépülése?** *(oxigénnel képezett vegyületek, komplexek, oxosavak és ezek bioszervesetlen kémiai szempontból fontos észterei, nitrogénmegkötés biológiai rendszerekben, foszfánok, foszfitok mint ligandumok átmenetifém-komplexekben)*
- 5. Jellemezze az oxigén, a kén és a szelén alapvegyületeit, valamint bioszervesetlen kémiai szempontból legfontosabb vegyületeit!** *(hidrogénnel képezett származékok, oxosavak, észterek, savak erőssége, az elemek beépülése biológiai rendszerekbe, oxigén-komplexek, szelénorganikus származékok)*

6. **Hasonlítsa össze a halogéneket és vegyületeiket a redoxi reakciókban való viselkedésük szempontjából! Ismertesse a fluor és a jód bioszervetlen kémiai jelentőségét!** *(halogenidek, interhalogének, oxosavak, a klorid-ion szerepe biológiai rendszerekben, jód-tartalmú hormonhatású vegyületek)*
7. **Jellemezze a titán- és a vanádium-csoport legfontosabb komplexeit és azok gyakorlati (katalitikus) alkalmazását!** *(oxidok, hidridek, fémorgaikus származékok, szerves és szervetlen ligandumokat tartalmazó komplexek, gyakorlati alkalmazások)*
8. **Jellemezze a króm-csoport elemeinek vegyületeit!** *(halogenidek, oxigéntartalmú származékok, izo- és a heteropolisavak, karbonil-, alkilidén-, alkilidin-komplexeik, semleges szerves ligandumokkal képezett komplexeik)*
9. **Ismertesse a vas csoport elemeinek fontosabb komplexeit, biokoordinációs kémiai szempontból jelentősebb származékait!** *(halogeno-, karbonil-, foszfán-komplexeik, hidrogénnel képezett származékok, hem és a hem-fehérjék, enzimek, B12 vitamin)*
10. **Jellemezze a platinafémeket! Mutassa be néhány fémorganikus származék példáján az oxidatív addíciót és a redukzív eliminációt! Ismertesse a legfontosabb, platinafém-komplexek által katalizált reakciót!** *(wilkinsoni-komplex, palládiumkomplexeik, platinakomplexeik, izomerizálási, hidrogénezési, karbonilezési reakciók, Suzuki, Heck, Sonogashira, Stille-reakció)*

2. TÉMAKÖR: SZERVES KÉMIA ZÁRÓVIZSGA TÉTELEK

1. **Aromaticitás és aromás jelleg - aromaticitás értelmezése 3-8 tagszámú gyűrűs vegyületekben. Az aromás vegyületek magban és oldalláncban történő reakcióinak ismertetése és értelmezése.** *Aromaticitás és aromás jelleg - aromaticitás értelmezése 3-8 tagszámú gyűrűs vegyületekben; Hammett-egyenlet, aromás elektrofil szubsztitúció, irányítási szabályok értelmezése; Nukleofil szubsztitúció aromás vegyületeken.*
2. **Karbonilvegyületek reakciói, különös tekintettel a szén-szén kötések kialakítására, az α -helyzetben lejátszódó szubsztitúciós reakciókra és a karbonilcsoport átalakításaira.** *Karbonilvegyületek reakciói – aldol-kondenzáció, Knoevenagel-kondenzáció, Wittig-reakció, hidridion vándorlással járó reakciók (Cannizzaro-reakció, Meerwein-Ponndorf-Oppenauer-reakció, karbonilvegyületek fémhidridekkel való redukciója); Umpolung-reakciók (benzoin-kondenzáció); α -Helyzetben lejátszódó szubsztitúciós reakciók (malonészter, acetecetészter alkilezése és további reakciói).*

3. **Sztereoselektív szintézisek és a kiralitáshoz kapcsolódó alapfogalmak és ezek jelentősége a szintetikus szerves kémiában.** *Sztereoselektív szintézisek – kiralitáshoz kapcsolódó alapfogalmak (enantiomerek, enantiomerfelesleg, diasztereomerek, sztereoselektív és sztereospecifikus reakciók, prokiralitás fogalma), királis aldehidek konformációja (a Felkin-Ahn modell alkalmazása), sztereoselektív aldol-reakciók, természetes enantiomerekből kiinduló szintézisek, királis segédanyagok, királis reagensek és királis katalizátorok.*
4. **Szén-szén kötés kialakítása nukleofil és elektrofil centrumok reakciójával és elemorganikus reakciók alkalmazásával.** *Szén-szén kötés kialakítása nukleofil és elektrofil centrumok reakciójával és elemorganikus reakciók alkalmazásával. Michael-reakció; énaminok alkilezése és acilezése; szomszédos kénatom által stabilizált karbanionokból kiinduló reakciók. Szén-szén kötés kialakítása aromás rendszereken (Friedel-Crafts, Gatterman-Koch, Vilsmeier-reakció, Mannich-reakció). Litiumorganikus reagensek; Grignard-reakció; Cu-, Cd- és Zn organikus reagensek; Pd-katalizált kapcsolási reakciók; olefin metatézis.*
5. **A nukleofil szubsztitúció alkalmazása a szerves kémiában, különös tekintettel a mechanizmus típusok ismertetésére és a szubsztitúciós reakciókat befolyásoló tényezőkre.** *A nukleofil szubsztitúció alkalmazása a szerves kémiában. Az S_N1 és S_N2 folyamatok értelmezése, főbb jellemzői. A Hammond-elv. Az R csoport, a távozócsoport, a nukleofil partner és az oldószer hatása a szubsztitúció kimenetelére. A végtermék térszerkezete és az a mechanizmus összefüggései. A szomszédócsoport hatás. Ambidens nukleofilok, a Kolbrun-szabály. A fázistranszfer katalízis alkalmazása a nukleofil szubsztitúcióban.*
6. **Addíciós és eliminációs reakciók mechanizmusai, tapasztalati szabályai és azok értelmezése. Az addíció és az elimináció alkalmazása a szintetikus szerves kémiában.** *Addíciós és eliminációs reakciók. A Markovnyikov-szabály értelmezése; az 1,3-butadién addíciós reakciói; 1,3-dipoláris cikloaddíció. Elimináció: $E1$, $E2$, $E1cB$ mechanizmusok, tapasztalati szabályok (Hofmann-, Zajcev-elimináció). A Curtin-Hammett-elv, a legkisebb mozgás elve. Az $E2$ reakció sztereokémiája. Az eliminációs reakció kimenetelét befolyásoló tényezők (oldószer, bázis stb.) Példa rendhagyó eliminációkra (Csugajev-reakció, aminoxidok pirolízise).*
7. **Öt- és hattagú, egy és több heteroatomot tartalmazó oxigén- és nitrogénheterociklusok elektronszerkezete, szintézise, előfordulása, szerepük és jelentőségük a biokémiai folyamatokban.** *Öt- és hattagú, egy és több heteroatomot tartalmazó oxigén- és nitrogénheterociklusok elektronszerkezete, szintézise, előfordulása. Heterociklusok előfordulása aminosavakban, nukleinsavakban, gyógyszerekben (néhány példával), vitaminokban és koenzimekben (biotin, ATP, tetrahidrofóliát, liponsav, piridoxál, tiamin, NAD, FMN).*
8. **Periciklusos reakciók jelentősége a szerves kémiában, a periciklusos reakciók értelmezése a molekulapályák szimmetriatulajdonságai alapján.** *Atompályák, molekulapályák értelmezése a VB- és MO-módszerrel. A hibridizáció.*

π -elektron hipotézis. Az allil-rendszerek, butadién és a poliének elektronszerkezetének értelmezése az MO-módszerrel. Periciklusos reakciók (Diels-Alder reakció, 2+2 addíció, elektrociklizáció, szigmatrop átrendeződések, keletrop reakciók) értelmezése a molekulapályák szimmetria tulajdonságai alapján.

9. **Homolitikus reakciók, fotoreakciók. Szabad gyökök, nitrének, karbének képződése, reakcióik és alkalmazásuk a szintetikus szerves kémiában.** *Homolitikus reakciók, fotoreakciók. Szabadgyökös folyamatok alkalmazása a szintetikus szerves kémiában (rekombináció, átrendeződés, diszproporcionálódás, gyökös szubsztitúciós és addíciós folyamatok). Stablis és nem stablis szabad gyökök. Nitrének, karbének képződése és reakciói. A fotokémiai reakciók főbb típusai (homolízis, szenzibiláció, átrendeződés, izomerizáció, semleges molekulák képződése).*
10. **Aminosavak, peptidek, lipidek, mono- és poliszacharidok szerkezete, szintézise és reakciói.** *Aminosavak, peptidek szerkezete és szintézise. Monoszacharidok, poliszacharidok szerkezete, szintézise és reakciói. Lipidek szerkezete.*

Ajánlott irodalom:

Szántay Cs. Elméleti szerves kémia, Műegyetemi kiadó, Bp.: 2005.

Felföldi, K.; Wölfling, J. Szerves szintézismódszerek, JATE Press, Szeged: 2011.

Antus, S.; Mátyus, P. Szerves kémia I-III, Nemzeti Tankönyvkiadó, Bp.: 2005.

Mackie, R. K.; Smith, D. M. Szerves kémiai szintézisek, Műszaki könyvkiadó, Bp.: 1986.

3. TÉMAKÖR: ANALITIKAI KÉMIA ZÁRÓVIZSGA TÉTELEK

1. **A mintavételezés tervezése és kivitelezése. Mintaelőkészítési, feltárási eljárások, dústítási módszerek. Az analitikai módszerek teljesítményjellemzői.** *A mintavétel szempontjai, oldás, feltárások, extrakció, szilárdfázisú extrakció, szuperkritikus fluid extrakció. Szelektivitás, linearitás, érzékenység, torzítatlanság, precizitás, ismételhetség, reprodukálhatóság, kimutatási hatás.*
2. **Titrimetria. Mérőoldatok, faktorozás, titrálási görbék, végpontjelzés, indikátorok, indikátorhiba. Savak és bázisok meghatározási lehetőségei.** *Térfogatos elemzés. Faktorozás, titrálási görbék, végpontjelzés, indikátorok, indikátorhiba. Sav és bázis mérőoldatok. Példák és alkalmazások: erős, gyenge és többértékű savak és bázisok meghatározása, titrálások nemvizes közegben.*
3. **A mellékreakciók és a komplexképződés szerepe az analitikai kémiában, stabilitási állandók, látszólagos stabilitási állandók. Komplexometriás titrálások.** *A komplexképződés szerepe az analitikai kémiában. Komplexképződési egyensúlyok, stabilitási állandók, a komplexek stabilitását befolyásoló tényezők,*

komplexometriás titrálási módszerek, titrálási görbék, a komplexometriás indikátorok működési mechanizmusa. Példák és alkalmazások, egymás melletti meghatározások, álcázás.

4. **Elektroanalitikai módszerek.** *Az elektródok típusai, indikátor- és referenciaelektródok. Direkt potenciometria és potenciometriás titrálás. Voltammetria: áram-feszültség görbék, polarográfia, leválási potenciál, diffúziós határáram, maradékáram, ciklikus és inverz voltammetria, stripping technika. Amperometriás: titrálás egy és két polarizálható elektróddal. Konduktometria, coulombmetria.*
5. **Optikai atomspektroszkópiai módszerek. Atomabszorpció. Emissziós atomspektroszkópiai módszerek.** *A spektroszkópiai módszerek megkülönböztetése energia, illetve a jellemző mozgás alapján; egyszerű spektrumok értelmezése. Atomspektroszkópia, atomizálás, gerjesztés, ionizálás és hibaforrások. Az atomabszorpciós eljárás és a készülék felépítés. Lángfotometria. Induktív csatolású plazma optikai emissziós módszer és a készülék felépítése. AAS és ICP-AES összehasonlítása az analitikai teljesítményjellemzők szempontjából.*
6. **Molekulaspektroszkópiai módszerek.** *Molekulaspektroszkópiai módszerek alapjai. Forgási és rezgési spektroszkópia. Kéttomos molekulák leírása, energiaszintek és kiválasztási szabályok. Az UV és látható spektroszkópia elvei, kiválasztási szabályai, rezgési finomszerkezet, gyakorlati alkalmazások, gerjesztett állapotok megszűnése, fluoreszcencia, foszforeszcencia.. Az anyag és az elektromágneses sugárzás közötti kölcsönhatás jellemzése. A látható, UV és infravörös spektrofotometria gyakorlata. Fényforrások, monokromátorok, detektorok. Színképek.*
7. **Műszeres analitikai eljárások (NMR, ESR, IR, MS, XRD) alkalmazása a szervetlen és szerves vegyületek analízisében. Korszerű 1D és 2D NMR módszerek a szerves vegyületek szerkezetének meghatározásában.** *Az elektron és az NMR spektroszkópia. Atommagok mágneses tulajdonságai, az NMR mérés elve, a spektrum kvalitatív leírása, kémiai eltolódás, spin-spin csatolás, alkalmazások.*
8. **A tömegspektrometria elvi alapjai és alkalmazásai.** *A tömegspektrométerek általános felépítése és a tömegspektrum keletkezése. Ionforrások (EI, CI, ESI, APCI, FAB és MALDI) és analizátor típusok (kvadrupol, ioncsapda és TOF). Elektroporlasztásos módszerek (ESI, APCI, APPI). Online LC-ESI MS. MALDI MS/MS és ESI-MS/MS módszerek és alkalmazásuk (peptidek, oligoszacharidok és kis molekulatömegű vegyületek szerkezetének meghatározása). Kapcsolt technikák alkalmazásai (ICP-MS, GC-MS, LC-MS). A különböző kísérleti technikák összehasonlítása a teljesítőképesség és alkalmazhatóság szempontjából.*
9. **A kromatográfiás módszerek elvi alapjai, eszközei és gyakorlati alkalmazásai.** *A gázkromatográf felépítése: vivőgázok, injektálási technikák, kolonnák típusai, állófázisok fajtái, izoterm és programozott hőmérsékletű GC. Detektorok. Minőségi azonosítás, a Kováts-féle retenciós index meghatározása és jelentősége. A folyadékkromatográfiás módszerek elvi alapjai, eszközei és gyakorlati alkalmazásai.*

Általános kromatográfiás fogalmak (t_R , t'_R , K , β , α , k , N , H , R_s definíciója). Sebességi elmélet. Van Deemter-egyenlet és grafikus ábrázolása. HPLC rendszer felépítése: szivattyúk, injektorok, oszlopok, detektorok. Álló- és mozgófázisok a normál és fordított fázisú technikáknál. Gradiens elúció. A megfelelő kromatográfiás módszer kiválasztásának módjai, szempontjai.

10. **Az elektroforetikus módszerek elvi alapjai, eszközei és legfontosabb alkalmazásai.** *Kapilláris elektroforézis, a készülék felépítése, elektroforetikus mobilitás, elektroosmotikus áramlás, kapilláris zónaelektroforézis, kapilláris gélelektroforézis, izoelektromos fókuszálás, izotachoforézis, micelláris elektrokinetikus kromatográfia.*

Irodalom:

Burger Kálmán: Az analitikai kémia alapjai. Kémiai és műszeres elemzés.

Kékedy László: Műszeres analitikai kémia I-III.

Daniel C. Harris: Quantitative Chemical Analysis

Douglas A. Skoog, F. James Holler, Stanley R. Crouch: Principles of Instrumental Analysis

4. témakör:

Fizikai-kémia záróvizsga tételek

1. **A termodinamikai rendszerek általános jellemzése** *(A termodinamika főtételei. Állapot- és útfüggvények. Kémiai potenciál és a Gibbs-Duhem egyenlet. Az S , U , H , A , G függvények és azok teljes deriváltjai. Maxwell-relációk. A Gibbs-féle fázistörvény és következményei. Ideális és reális gázok viselkedését leíró összefüggések.)*
2. **A kémiai reakciók kinetikája és mechanizmusa** *(Elemi reakciók sebességi egyenletének általános alakjai, azok megoldása. Összetett reakciók sebességi egyenleteinek megoldása. Kvázistacionárius és gyors előegyensúlyi közelítés. Láncreakciók. Katalízis és inhibíció. Reaktív ütközések: Ütközési elmélet, diffúziógátolt reakciók, Arrhenius-egyenlet. Aktivált komplex elmélet: reakciókoordináta és átmeneti állapot, Eyring-egyenlet.)*
3. **A kvantummechanikai atommodell kísérleti alapjai** *(A fotonhipotézis és a foton sajátságai, fénynyomás. Feketetest-sugárzás és értelmezése. A hidrogén atomspektruma és értelmezése a Bohr-moddal. Anyag-hullám kettősség, De Broglie-egyenlet. Fotoelektromos hatás. Egy- és kétréses kísérlet.)*
4. **A hullámmechanika alapjai és használata modellrendszerekben** *(A hullámfüggvény és sajátságai: a szuperpozíció elve, Born-féle valószínűségi értelmezés, normálás, alapállapot. Határozatlansági relációk. Időtől függő és stacionárius Schrödinger-egyenlet. Operátorok használata a kvantummechanikában, operátorsajátérték-egyenletek. A szabad mozgás, a dobozba zárt részecske és a harmonikus oszcillátor modellrendszere. Alagúteffektus.)*

5. **Atomok és molekulák szerkezetének hullámmechanikai leírása** (A Coulomb-törvény. Impulzusmomentum, a síkbeli és térbeli keringőmozgás leírása a hullámmechanikában. Hidrogénszerű atomi részecskék elektronszerkezetének leírása. Sokrészecske-rendszerek kezelésének alapjai. A hidrogénmolekula-ion elektronszerkezete. Molekulák elektronszerkezetének leírása vegyértékkötés és molekulapálya módszerrel.)
6. **Statisztikus termodinamika** (Sokaságok pillanatnyi konfigurációi, statisztikus súlya. Állapotösszeg és a benne tárolt információ. Boltzmann-eloszlás. Haladó, forgó, és rezgő mozgások állapotösszege. A kanonikus sokaság fogalma, termodinamikai függvények számítása állapotösszegekből. Hőkapacitás, zéruspont-entrópia és egyensúlyi állandó számítása statisztikus termodinamikával)
7. **Az irreverzibilis termodinamika alapjai** (Entrópiaprodukció, minimális entrópiaprodukció eleve és általános evolúciós kritérium. Áramok és erők Onsager-féle elmélete, reciprocitási relációk. A nem folytonos rendszer. Hőátadás, termodiffúzió, termoozmózis, áramlási- potenciál, elektroozmózis, Peltier-hatás, Seebeck-hatás. Affinitás és De Donder-egyenlet kémiai reakciórendszerekben. Irreverzibilis termodinamika folytonos formalizmussal.)
8. **Kolloid rendszerek kémiája** (Határfelületi többletenergia és következményei. Felületi feszültség, nyomásegyensúly görbült felülettel elválasztott fázisok között. Folyadék- folyadék határfelület, szilárd-folyadék határfelület. Diszperz rendszerek jellemzői, eloszlás, morfológia, diszperzitás fok. Kolloid rendszerek stabilitása, a stabilitást befolyásoló tényezők. Elektromos kettősréteg, elektrokinetikai potenciál, elektrokinetikus jelenségek.)
9. **Kolloid rendszerek jellemzése és vizsgálati módszerei** (Kolloidok méretének és méret eloszlásának meghatározására szolgáló módszerek. Az adszorpció jelensége, adszorpciós hő, adszorpciós állapotegyenletek, adszorpciós izotermák (Freundlich, Langmuir, BET), adszorpciós hiszterézis.) Asszociációs kolloidok, micellaképződés. A micella- képződést befolyásoló tényezők. Liposzómák, Langmuir-Blodget rétegek. Szolubilizáció. Makromolekulás kolloidok. Polimer oldatok. A statisztikus gombolyag. Polielektrolitok.)