

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 szervetlen vegyületeit, elemorganikus származékait és bioszervetlen 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 alkalmazásaik*)
2. **Jellemezze a bór és az alumínium fontosabb szervetlen vegyületeit, elemorganikus származékait!** (*hidridek, halogenidek, oxigéntartalmú származékok, bórorganikus vegyületek és szintetikus alkalmazásaik, alumínium-organikus vegyületek szintézise és gyakorlati alkalmazása*)
3. **Jellemezze a szilícium, az ón és az ólom fontosabb szervetlen 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 bioszervetlen kémiai szempontból fontos észterei, nitrogénmegkötés biológiai rendszerekben, foszfánok, foszfitok mint ligandumok átmenetifém-komplexekben*)
5. **Jellemezze az oxigén, a kén és a szelén aalpvegyületeit, valamint bioszervetlen 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 eleminek fontosabb komplexeit, biokoordinációs kémiai szempontból jelentősebb származékait!** (halogeno-, karbonil-, foszfán-komplexek, 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, palládiumkomplexek, platinakomplexek, 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. **Sztereoszelektív szintézisek és a kiralitáshoz kapcsolódó alapfogalmak és ezek jelentősége a szintetikus szerves kémiában.** Sztereoszelektív szintézisek – kiralitáshoz kapcsolódó alapfogalmak (enantiomerek, enantiomerfelesleg, diasztereomerek, sztereoszelektív és sztereospecifikus reakciók, prokiralitás fogalma), királis aldehidek konformációja (a Felkin-Ahn modell alkalmazása), sztereoszelektív 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). Lítiumorganikus 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 szomszédcsoport 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: E_1 , E_2 , E_{1cB} mechanizmusok, tapasztalati szabályok (Hofmann-, Zajcev-elimináció). A Curtin-Hammet-elv, a legkisebb mozgás elve. Az E_2 reakció sztereokémiája. Az eliminációs reakció kimenetelét befolyásoló tényezők (oldószer, bázis stb.) Példa rendhagyó eliminációkra (Csugajev-reakció, aminosavak 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, tetrahidrofolát, 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). Stabilis és nem stabilis szabad gyökök. Nitrének, karbének képződése és reakciói. A fotokémiai reakciók főbb típusai (homolízis, szenzibilizáció, átrendeződés, izomerizáció, semleges molekulák képződése).*
- 10. Aminosavak, peptidok, lipidek, mono- és poliszacharidok szerkezete, szintézise és reakciói.** *Aminosavak, peptidok 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, dúsítási 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 nemvízes 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, coulometria.*
5. **Optikai atomspektroszkópiai módszerek. Atomabszorpció. Emissziós atom-spektroszkópiai 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, a fotoionizációs spektroszkópia elvi alapjai (XPS, UPS), ESCA. 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 szerves és szerves vegyületek analízisében. Korszerű 1D és 2D NMR módszerek a szerves vegyületek szerkezetének meghatározásában.** *Pörgettyűtípusok, a forgási spektroszkópia alkalmazásai. 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 folyadékromatográfiás 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 alkalmazásaik.** 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** (Állapotfüggvények. A Gibbs-Duhem egyenlet. Az S , U , H , A , G függvények és azok teljes deriváltjai. Maxwell relációk. A Gibbs-féle fázistér, időátlag és sokaságra vonatkoztatott átlag. Ergodikus hipotézis. Egyensúlyi termodinamikai rendszerek. Mikrokanonikus, kanonikus és nagykanonikus sokaságok. Termodinamikai mennyiségek értelmezése. A molekuláris állapotösszeg. Termodinamikai valószínűség ideális rendszerek esetén. Betöltési számok legvalószínűbb értékei mikrokanonikus rendszerek esetén. Belső energia és statisztikus entrópia.)
2. **Elektrolitok szerkezete és elektrokémiai mérési módszerek** (Áram vezetése másodfajú vezetőkben, Elektrolitok szerkezete, Debye-Hückel elmélet. Elektrolitoldatok elektromos vezetésének kísérleti meghatározása. Az átviteli szám meghatározására alkalmas módszerek. Elektródok, az elektrokémiai cella. Az elektromotoros erő mérése. Az elektromotoros erő hőmérsékletfüggésének vizsgálata alapján meghatározható termodinamikai mennyiségek. Elektrokémiai áramforrások. Az elektrokémiai mikroszkóp felépítése és működése. Ciklikus voltammetria, impulzus voltammetria.)
3. **A kémiai reakciók mechanizmusa** (Elemi reakciók sebességi egyenletének általános alakjai, azok megoldása. Összetett reakciók sebességi egyenleteinek megoldása. Kvázistacionaritás. Láncreakciók. Katalízis és inhibíció. Kémiai reakciók molekuláris dinamikája. Reaktív ütközések: Ütközési elmélet, diffúziógátolt reakciók, anyagmérleg-egyenlet. Aktivált komplex elmélet: reakciókoordináta és átmeneti állapot, Eyring-egyenlet. Potenciális energiafelületek. A molekuláris környezet hatása: Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus elmélet.)

4. **Folyamatok szilárd felületeken** (A felületi folyamatok sebessége. A kristályok növekedése, összetétele és szerkezete. Fiziszorpció, kemiszorpció és adszorpciós izotermák. A (Gibbs-féle) határfelületi termodinamika alapjai. A Gibbs-féle adszorpciós egyenlet és alkalmazása. Kapilláraktív és inaktív anyagok. Homogén illetve heterogén kémiai reakciók előrehaladásának követésére alkalmazott fizikai-kémiai módszerek, az alkalmazott mérőeszközök működése. Kémiai reakciók kinetikus rendjének meghatározása.)
5. **A felület szerkezetének és a felületi folyamatok vizsgálata** (Közeltéri mikroszkópiák: SEM: scanning electron microscope, STM: scanning tunneling microscope, AFM: atomic force microscope /contact AFM, non contact AFM, dynamic contact AFM/, MFM: magnetic force microscope, EFM: electrostatic force microscope, KPFM: kelvin probe force microscope. SERS: Surface Enhanced Raman Spectroscopy és TERS: Tip Enhanced Raman Spectroscopy mérések elve)
6. **Az anyag szerkezete és alapvető kölcsönhatások** (Atomok, ionok, molekulák alapvető kölcsönhatásainak leírása. Coulomb törvény, Lennard-Jones potenciál. Gyenge molekuláris kölcsönhatások, van der Waals-féle erők, dipólusirányítási, vagy Keesom-féle erők. Debye-féle indukciós kölcsönhatások, diszperziós, vagy London-féle kölcsönhatások. Elektron spin értelmezése. Schrödinger-Gordon-egyenlet, Weil-egyenlet. Kontinuitási egyenlet és a Dirac-egyenlet Lorentz-invarianciája. Az elektromágneses térrel kölcsönható töltött részecske Dirac-egyenlete. Spektroszkópiai következmények. Határozatlansági elv és a spektrumvonalak természetes kiszélesedése.)
7. **A spektroszkópiai mérések elve, a spektrumot meghatározó anyagi jellemzők** (A spektrumvonalak intenzitásának és a sáv szélesség klasszikus és kvantumos leírása. Molekulák szimmetriája. A szimmetriaelemek, karaktertáblák felépítése, reducibilis és irreducibilis reprezentációk. A víz pontcsoportba sorolása, bázistranszformációk. Kiválasztási szabályok, belső koordináták, normál koordináták, a szimmetria szerepe, alkalmazások. A víz rezgési spektruma, rezgéseinek szimmetriája és ezek transzformációi. IR és Raman spektrumok csoportelméleti értelmezése.)
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, elektrokinetika potenciál, elektrokinetikus jelenségek. Asszociációs kolloidok, micellaképződés. A micellaképződést befolyásoló tényezők. Liposzómák, Langmuir-Blodgett rétegek. Szolubilizáció. Makromolekulás kolloidok. Polimer oldatok. A statisztikus gombolyag. Polielektrolitok.)
9. **Kolloid rendszerek vizsgálati módszerei** (Kolloidok méretének és méret eloszlásának meghatározására szolgáló módszerek. Reológiai alapfogalmak. Folyástípusok, azok anyagszerkezeti magyarázatai. Gumirugalmasság. Az adszorpció jelensége, adszorpciós hő, adszorpciós állapotegyenletek, adszorpciós izotermák (Freundlich, Langmuir, BET), adszorpciós hiszterézis.)