

12. Szerves Kémiai Problémamegoldó Verseny

Rajtszám:



Instrukciók

- Ellenőrizd minden lapon a rajtszámodat!
- Ellenőrizd az adataidat a mellékelt adatlapon, utána tedd a borítékba, zárd le és majd add le a feladatsorral együtt!
- A feladatok megoldására 3 óra áll rendelkezésre. Csak a START utasítás elhangzása után kezdhetsz el dolgozni!
- Csak a megfelelő helyre írt válaszaidat fogadjuk el (Rendszerint a megfelelő négyzetekben).
- Piszkozatpapírnak használhatod a lapok hátoldalát! Ha ez nem elég kérhetsz még papírt!
- Ahol szükséges jelöld a sztereokémiát! A sztereokémia jelölésére használd a megfelelő ékeket (\blacktriangleleft ; \cdots)!
- A dolgozat megoldásához bármilyen papír alapú, nem elektronikus segítséget (könyv, jegyzet) használhatsz. Számológép is használható.
- A kikészített asztalokon találsz üdítőt és harapnivalót. A feladatsor megoldása közben is kimehetsz értük csendben, de ezt jelezd a felügyelőnek!
- Amikor elhangzik a STOP utasítás, azonnal hagyd abba a munkát! Ha 3 percnél tovább késlekedsz, érvénytelenítik a dolgozatodat!
- A távozással várj addig, amíg a felügyelő jelzi, hogy elmehetsz!

Periódusos rendszer relatív atomtömegekkel

1																		18		
1 H 1.008																				2 He 4.003
3 Li 6.94	4 Be 9.01											5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18			
11 Na 22.99	12 Mg 24.30	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95			
19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.87	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.69	29 Cu 63.55	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.63	33 As 74.92	34 Se 78.97	35 Br 79.90	36 Kr 83.80			
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.95	43 Tc -	44 Ru 101.1	45 Rh 102.9	46 Pd 106.4	47 Ag 107.9	48 Cd 112.4	49 In 114.8	50 Sn 118.7	51 Sb 121.8	52 Te 127.6	53 I 126.9	54 Xe 131.3			
55 Cs 132.9	56 Ba 137.3	57-71	72 Hf 178.5	73 Ta 180.9	74 W 183.8	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.1	79 Au 197.0	80 Hg 200.6	81 Tl 204.4	82 Pb 207.2	83 Bi 209.0	84 Po -	85 At -	86 Rn -			
87 Fr -	88 Ra -	89-103	104 Rf -	105 Db -	106 Sg -	107 Bh -	108 Hs -	109 Mt -	110 Ds -	111 Rg -	112 Cn -	113 Nh -	114 Fl -	115 Mc -	116 Lv -	117 Ts -	118 Og -			

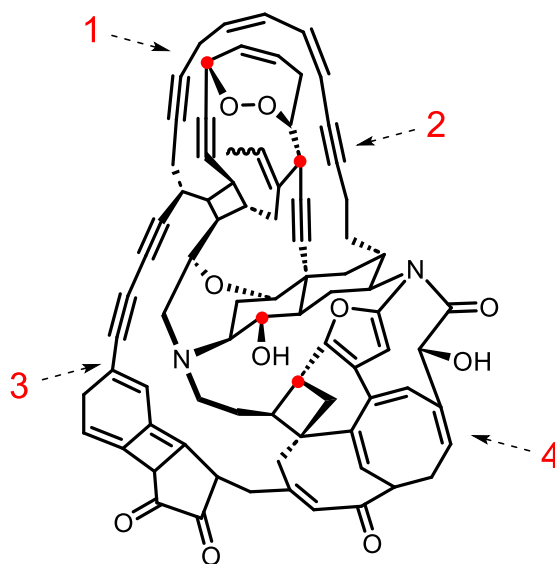
57 La 138.9	58 Ce 140.1	59 Pr 140.9	60 Nd 144.2	61 Pm -	62 Sm 150.4	63 Eu 152.0	64 Gd 157.3	65 Tb 158.9	66 Dy 162.5	67 Ho 164.9	68 Er 167.3	69 Tm 168.9	70 Yb 173.0	71 Lu 175.0
89 Ac -	90 Th 232.0	91 Pa 231.0	92 U 238.0	93 Np -	94 Pu -	95 Am -	96 Cm -	97 Bk -	98 Cf -	99 Es -	100 Fm -	101 Md -	102 No -	103 Lr -

A feladatok listája és arányuk az összpontszámban

Feladat	Arány (%)	Oldalszámok
1.	2,75	5-6
2.	4,5	7-9
3.	4,5	10-11
4.	5,5	12-14
5.	5,5	15-18
6.	5,5	19-20
7.	5,75	21
8.	6	22-23
9.	6	24-25
10.	7	26-27
11.	7	28-29
12.	9	30-31
13.	9	32-33
14.	11	34-35
15.	11	36-38
Σ	100	1-38

1. feladat		az egész 2,75%-a		
	1A	1B	1C	Összesen
Max	5	6	3	14
Elért				

1A. Párizs híres múzeumában, a Louvre-ban az egyik festmény hátoldalán megjelent egy penészfolt. A múzeumban dolgozó aggódó alkalmazottak a Sorbonne Egyetem legjobb kémikusait hívták segítségül, hogy megakadályozzák a gomba elszaporodását és így megmentsek a felbecsülhetetlen értékű képet. A kémikusok megállapították, hogy a gomba elkezdte magába szívni a művészetet és enzimei segítségével lebontani azt, eközben pedig számos vegyületet állított elő. Az izolált vegyületek sorában a Monoalizeamine D a legjelentősebb, mivel a benne található peroxidkötés kiemelkedően korrozívá teszi. A vegyészek munkája azonban itt elakadt és a vegyület karakterizálása pár ponton még várta magára. *Add meg a jelölt atomok konfigurációját CIP konvenció szerint és a szerkezetből következtetve nevezd meg a festményt, melyet elkezdett metabolizálni a természet!*

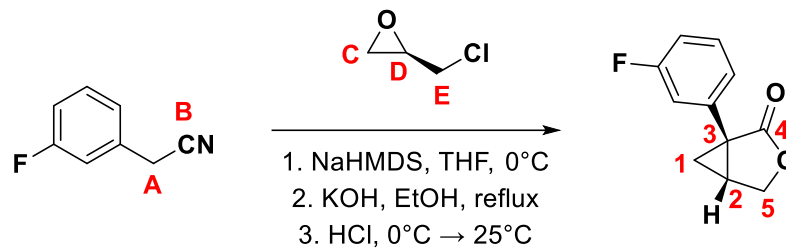


Monoalizeramine D

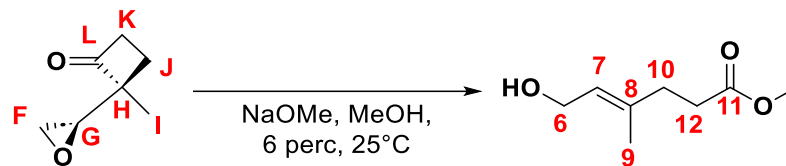
1.		2.		3.		4.	
----	--	----	--	----	--	----	--

Eredeti festmény:

1B. Azonosítsd be az alábbi termékekben a kiindulási építőelemek megjelölt szénatomjait!

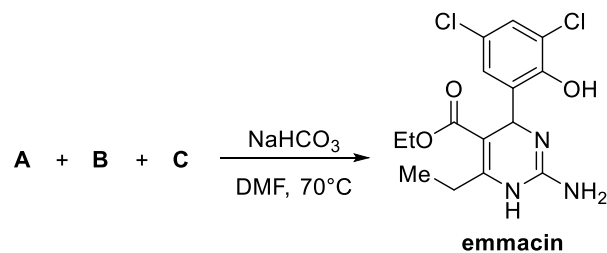


A		B		C		D	
E							



F		G		H		I	
J		K		L			

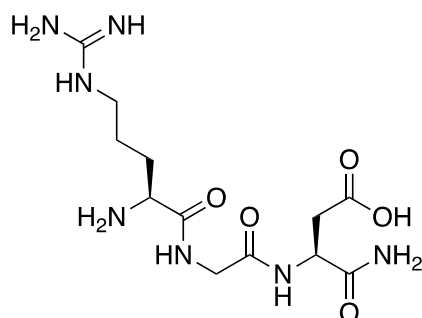
1C. Az emmacin egy MRSA-törzsek ellen aktivitást mutató, antibakteriális hatású vegyület. Karikázd be, mely megfelelő **A**, **B** és **C** építőegységekből állítható elő!



A:					
B:					
C:					

2. feladat			az egész 4,5%-a			
	2A	2B	2C	2D	2E	Összesen
Max	3	3	3	2	6	17
Elért						

2A. A sejtadhéziós integrin receptorok általános liganduma az alábbi (RGD) tripeptid:

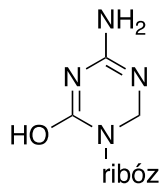


Milyen formában van jelen a tripeptid pH=7,4 oldatban (fiziológias körülmények között)?
 Rajzold fel a szerkezetét és jelöld, hogy mely csoportok vannak protonálva/deprotonálva!

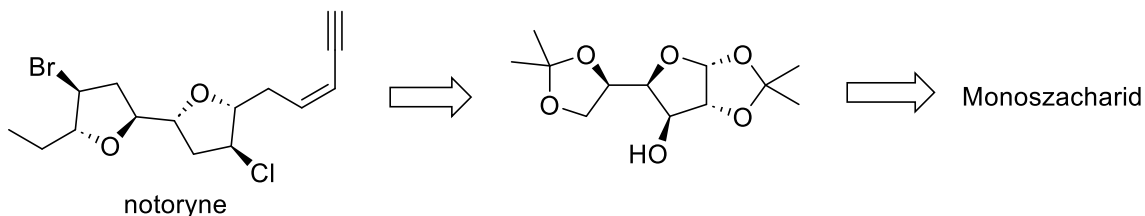
Add meg a tripeptid nettó töltését az oldatban!

2B. Egy nem ciklikus dipeptid hidrolízise során csak L-glutaminsavat kaptak termékül. Hány különböző dipeptid esetében juthatunk ugyanerre az eredményre?

2C. Az alábbi vegyület antivirális hatását annak köszönheti, hogy képes bázispárt alkotni bármelyik purin bázissal. *Rajzold le a guaninnal alkotott bázispár szerkezeti képletét, mely annak eredeti Watson-Crick bázispárjához nagyon hasonló (a guanin ugyanazokkal a csoportokkal alkot H-kötést, ugyanolyan módon)! A H-kötéseket szaggatott vonallal jelöld!*



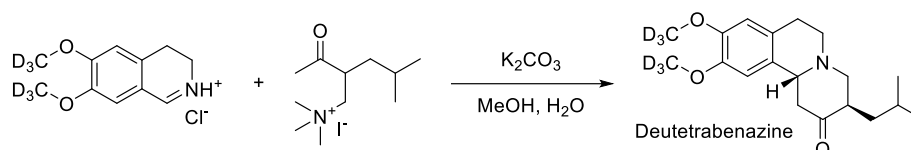
2D. 1991-ben egy notoryne nevű vegyületet izoláltak a *Laurencia nipponica* vörös algából a Japán szigetvilág szélén. Az új vegyület szerkezetét felderítették, majd évekkel később szintetikusán is előállították egy monoszacharidból kiindulva, bizonyítva ezzel a feltételezett szerkezetet.



A többszörösen halogénezett, telítetlen vegyületet több szintetikus lépésen keresztül állították elő egy könnyedén hozzáférhető acetálból, ami egyszerűen elkészíthető a megfelelő monoszacharid és aceton reakciójával. *Mi a kiindulási vegyületként használt monoszacharid?*

2E. A Huntington-kór egy súlyos neurodegeneratív betegség, melyre ugyan folyamatosan fejlesztenek gyógyszereket, tökéletes megoldást sajnos idáig még nem sikerült találniuk. Az első nagyobb áttörést a kór gyógyításában a tetrabenazin jelentette, melynek ugyan hatásmechanizmusa ismeretlen volt és a szervezetben is elég gyorsan metabolizálódott, de a pácienseknél jelentős életkörülmény-javulást eredményezett. A gyors metabolizmust elkerülendő, a molekulán található metoxicsoportokat deuterálták, ami jelentősen megnövelte a gyógyszer szerkezeten belüli stabilitását.

Az Austedo gyógyszergyár egy rövid és igen hatékony szintézist dolgozott ki a gyógyszer előállítására, melyet az alábbi ábra szemléltet. A két ammóniumsót vizes-metanolos közegben, bázis jelenlétében kondenzáltatták a triciklikus vegyület előállításának céljából igen jó termeléssel.



A fenti átalakítás során három reakció játszódik le egymás után. Ezek jól ismert névreakciók.
Add meg ezeket a névreakciókat a megfelelő sorrendben!

1.	
2.	
3.	

3. feladat	az egész 4,5%-a	
	3	Összesen
Max	10	10
Elért		

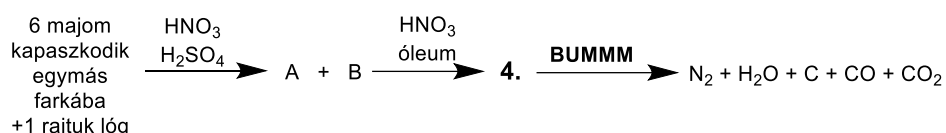
Töltsd ki a következő oldalon található keresztrejtvényt az adott vegyületek szakirodalomban is használatos rövidítésével!

1. Ferrocén vázat tartalmazó, királis difoszfán ligandum, melyet elsősorban homogén katalitikus hidrogénezésekhez alkalmaznak. Nevét első készítőjéről, Josi Puleo-ról kapta.

2. Poláris, aprotikus folyadék, melynek deuterált származéka közkedvelt oldószer NMR vizsgálatokban. A proton lecsatolt ^{13}C -NMR mérésekben jellegzetes heptett jelet ad. A Swern-oxidáció egyik reagense.

3. Hírhedten rákkeltő foszforsav-amid, amely kiválóan szolvatálja a kationokat, ezáltal mind szubsztitúciós, mind metallálási reakciókat elősegít. Összegképlete: $\text{C}_6\text{H}_{18}\text{N}_3\text{OP}$

4.



5. Színtelen, bázisként is használt folyadék. Állás hatására az azonos nevű ital színét veszi fel.

6. Tercier-aminocsoportokat tartalmazó háromfogú ligandum, amellyel BuLi -t komplexálva a kapott bázis általában a termodinamikailag legsavasabb protont szakítja le, mivel a koordinatíve telített lítium ion nem tud a szubsztrát Lewis-bázikus atomjaihoz kötni (nem úgy mint kétfogú testvére, a TMEDA esetében).

7. Halogén tartalmú vegyület, melyet védőcsoportok felvitelére, illetve poláris molekulák illékonyságának növelésére is alkalmaznak. ^1H - és ^{13}C -NMR belső standard is előállítható belőle MeMgX -el reagáltatva. Móltömege: 108,5 g/mol.

8. Csökkentett nukleofilitású, nem fémorganikus bázis, amely kiválóan alkalmas halogenidek, nitrilek, ketonok és oxiránok deprotonálására is, mivel nem vált ki halogén-fém cserét és nem addicionálódik a fentebb említett csoportokra.

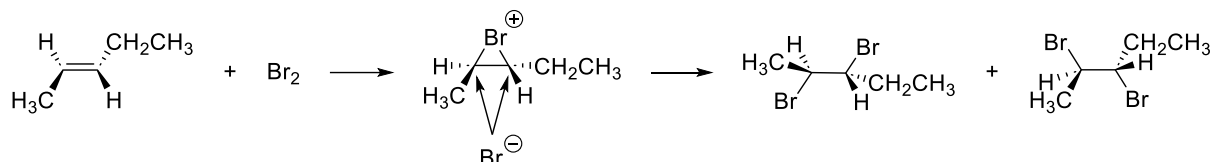
9. Egy rendkívül jó komplexképző, melyet alkalmaznak mosószer adalékanyagként, gyógyszerként a kelátterápiában, és mint mérőoldat komplexometriás titrálásokban. Összegképlete: $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{O}_8$

10. Kellemetlen szagú oldószer, melyet bázisként is alkalmazhatnak. Származékai többek között a B vitaminok és a nikotin.

X. Író és kémikus. Művei többek között: The Elements of Murder (2005), Molecules of Murder (2008), More Molecules of Murder (2017), mindhárom ajánlott olvasmány.

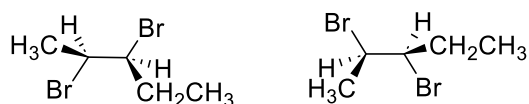
4. feladat				az egész 5,5%-a			
	4A	4B	4C	4D	4E	4F	Összesen
Max	2	2	2	2	2	2	12
Elért							

Az alkének bromáddíciója egy ún. bromónium ion intermedieren keresztül történik:



A pozitív töltést viselő brómatom elfoglalja az intermedier egyik térfelét, ezért a bromidion csak a másik térfél irányából támadhat. Ennek köszönhetően a folyamat sztereoselektív, azaz nem keletkezik minden elvileg lehetséges sztereoizomer. A transz-pent-2-én esetén például csak a fent feltüntetett térszerkezetű molekulák képződnek.

Ha a brómatomok belépése nem csak ellentétes térfélről (ún. anti-helyzetben) történhetne meg, akkor a transz-pent-2-én bromozása során keletkezhetne a másik két lehetséges sztereoizomer is:

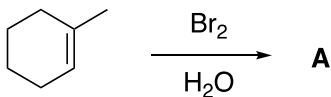


A következőkben 8 szénatomos, egyetlen kettős kötést tartalmazó molekulák bromáddícióját vizsgáljuk. *Rajzold fel egy-egy olyan nyílt láncú, ill. gyűrűs olefin szerkezetét, amelyre teljesül az állítás!*

4A. A bromáddíció során a három lehetséges tériszomer közül csak egy képződik.	
nyílt láncú	gyűrűs
4B. Brómáddíció során a három lehetséges tériszomer közül kettő képződik, melyek enantiomerek.	
nyílt láncú	gyűrűs

4C. A brómaddíció során a két lehetséges térizomer közül mindkettő képződik, melyek enantiomerek.	
nyílt láncú	<i>gyűrűs</i>
4D. A brómaddíció során a két lehetséges térizomer közül mindkettő képződik, melyek diasztereomerek	
nyílt láncú	<i>gyűrűs</i>
4E. A brómaddíció során keletkező terméknek nincsenek sztereoizomerjei.	
nyílt láncú	<i>gyűrűs</i>

4F. A brómozás során azonban más termékek is keletkezhetnek, ha a reakció vizes közegben megy végbe. Milyen főtermék(ek) keletkezése várható az 1-metil-ciklohex-1-én vizes oldatban történő brómozása során? A képlet(ek)ben mutasd a térszerkezetet is! Használj a sztereokémia jelölésére ékeket (◄; ⋯)!



5. feladat				az egész 5,5%-a				
	5A	5B	5C	5D	5E	5F	5G	Összesen
Max	4	1	2	6	4	1,5	6	24,5
Elért								

Két izomer szénhidrogén (**A** és **B**) 85,7 m/m% szenet tartalmaz. Mindkét vegyületet ózonnal reagáltatva, majd a terméket cinkkel és savval kezelve a **C** szerves vegyületet kapjuk. A **C** oxidációja egy terméket ad: a **D** karbonsavat. A $^1\text{H-NMR}$ spektrum szerint a karbonsav minden protonja (kivéve a karboxilcsoport protonját) metilcsoportoz tartozik. A **D** vegyület $170\text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékleten és 1010 hPa nyomáson gáz halmazállapotú, sűrűsége: $5,6\text{ g/dm}^3$. Az **A** vegyület reaktívabb, mint a **B** a hideg, neutrális kálium-permanganáttal való reakcióban. Előbbi esetben az **F**, utóbbiban **G1** és **G2** 1:1 arányú izomerelegye keletkezik.

5A. Rajzold fel az A és B vegyületek izomerjeinek szerkezeti képletét!

A	B
----------	----------

5B. Add meg a C vegyület képletét!

C

5C. Rajzold fel a D vegyület szerkezeti képletét vizes oldatban, illetve gázfázisban!

D (vizes oldatban)	D (gáz fázisban)

5E. Rajzold fel az F, G1, G2 vegyületek szerkezetét! Használj a sztereokémia jelölésére ékeket (◄;.....)!

F	
G1	G2

5F. **G1** és **G2** acetonnal sav jelenlétében **H1** és **H2** vegyületekké alakul. *Add meg a **H1** és **H2** képletét! Használj a sztereokémia jelölésére ékeket (◀; …)!*

H1	H2

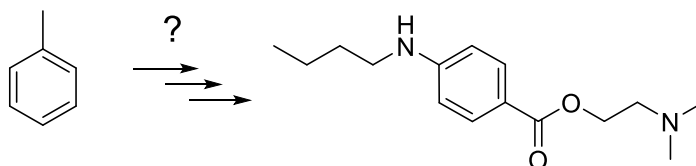
5G. Az alkének persavakkal történő sztereospecifikus epoxidálási reakciójában oxirángyűrűt tartalmazó termékek keletkeznek. Az **A** vegyület persavval történő epoxidálása egyedül a **K** terméket eredményezi. Azonos körülmények között a **B**-ből kiinduló reakció az **L1** és **L2** 1:1 arányú izomerelegyét eredményezi. *Optikailag aktívak-e a **K**, **L1**, illetve **L2** vegyületek? Rajzold fel ezek térszerkezetét is! Használj a sztereokémia jelölésére ékeket (◀; …)!*

Optikailag aktív?	Igen	Nem
K	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
L1	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
L2	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

K		
L1	L2	

6. feladat	az egész 5,5%-a	
	6	Összesen
Max	7	7
Elért		

Állítsd elő a végtermékként megadott vegyületet a feltüntetett kiindulási anyagból több lépésen keresztül, a megfelelő reagensek felhasználásával!



7. feladat			az egész 5,75%-a		
	A	B	C	D	Összesen
Max	2	2	1	1	6
Elért					

Albert Baur 1888-ban érdekes megfigyelést tett, amelyet egy lelkes hallgató napjainkban megismételt. Toluolt Friedel-Crafts reakcióban reagáltatott izobutil-bromiddal (1-bróm-2-metil-propán), majd a kapott monoszubsztituált terméke(ke)t nitrálta tömény salétromsav és kénsav elegyével. Feldolgozást követően a reakcióelegyből egy sárga kristályos anyagot izolált. A meglepő dolog a sárga kristályok illata volt, mivel a reakciósor végén egy pézsma illatú anyaghoz jutott. A felfedezést szisztematikus vizsgálat követte, és megállapította, hogy csak a TNT-hez hasonló szerkezetű, 3 nitrocsoportot tartalmazó molekula rendelkezik a ritka illattal. A sárga, kristályos, pézsma illatú anyagot (**A**) modern szerkezetvizsgáló módszerekkel is elemezte. Az illatos vegyület $^1\text{H-NMR}$ spektrumában 3 db szingulett jelet talált. A nitrálás reakcióelegyből kromatográfiás módszerrel izolált egy visszamaradó anyagot (**B**) is, amely $^1\text{H-NMR}$ spektrumában szintén 3 db szingulettet talált. Ezen jelek intenzitás aránya 9:3:2. Ezután a Friedel-Crafts reakció termékelegyét is megvizsgálva két vegyületet sikerült izolálnia. Ezekről $^{13}\text{C-NMR}$ spektrumokat vett fel. Az egyikben (**C**) 7 jel, míg a másikban (**D**) 9 jel volt található.

Az **A** vegyület **D**-ből, míg **B** a **C**-ből képződött. Mi lehet Albert Baur pézsma illatú anyagának szerkezete? *Rajzold fel az A-D vegyületek képletét!*

A	B
C	D

8. feladat			az egész 6%-a		
	8A	8B	8C	8D	Összesen
Max	5	1	2	3	11
Elért					

Trifenil-klórmetánt éteres oldatban nátrium amalgámmal reagáltatunk (1. reakció). A keletkezett éteres oldatba 1 ekvivalens etil-izobutirátot csepegtetünk, majd 10 perc elteltével 1 ekvivalens benzoil-kloridot adagolunk (2. reakció). 2 óra kevertetés után a visszamaradt nyersterméket vizes ecetsav-oldattal, majd nátrium-karbonáttal mossuk és Na_2SO_4 -on szárítjuk. Az étert eltávolítjuk, majd hűtés hatására fehér kristályos anyag válik ki a keverékből, ezt leszűrjük (**A** termék). A másik terméket (**B**), ami egy folyadék (fp: 265-270 °C), desztillációval tisztítjuk (146-148 °C, 15 Hgmm). Az **A** vegyület ^{13}C -NMR spektruma 5 db jelből áll.

8A. Rajzold fel **A** és **B** vegyületek szerkezetét!

A	B
----------	----------

8B. Királis-e a **B** vegyület?

igen

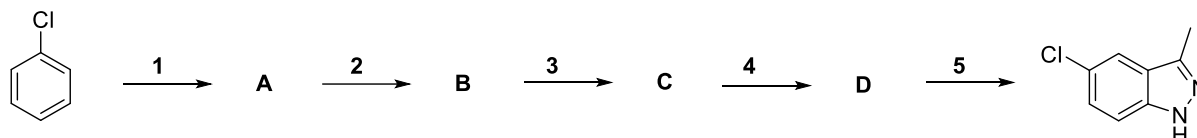
nem

8C. Az 1. reakcióban létrehozott reagens helyett milyen más reagenst lehetne használni?

8D. *Rajzold fel a 2. reakció mechanizmusát!*

9. feladat		az egész 6%-a	
	9A	9B	Összesen
Max	5	4	9
Elért			

Aromás vegyületeknek számos reaktivitása jól ismert és igen szelektív reakciókat tesz lehetővé. Az alábbi sematikus ábra alapján klórbenzolból kiindulva 3-metil-5-klórindazolt szeretnénk előállítani. Ehhez a következő reakciósor hajtottuk végre:



9A. Add meg, hogy az adott reagenseket melyik lépéshez használjuk!

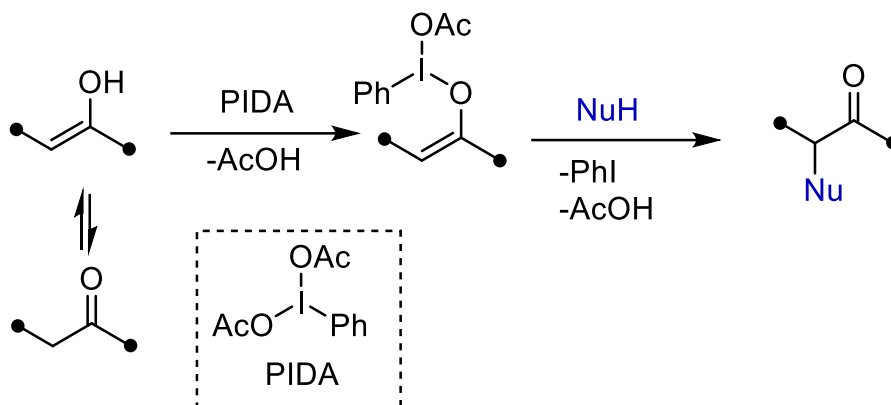
Reagens	Lépés száma
HCl, NaNO ₂ , CuCl	
HNO ₃ , H ₂ SO ₄	
N ₂ H ₄	
AcCl, AlCl ₃	
H ₂ , Pd(C)	

9B. Rajzold fel az A-D vegyületek szerkezetét!

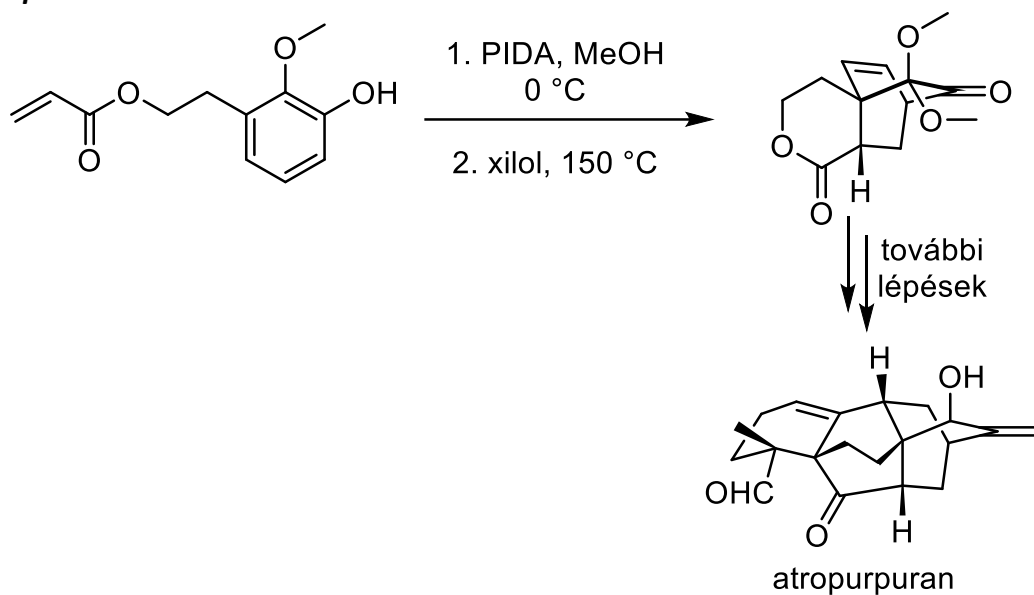
A	B
C	D

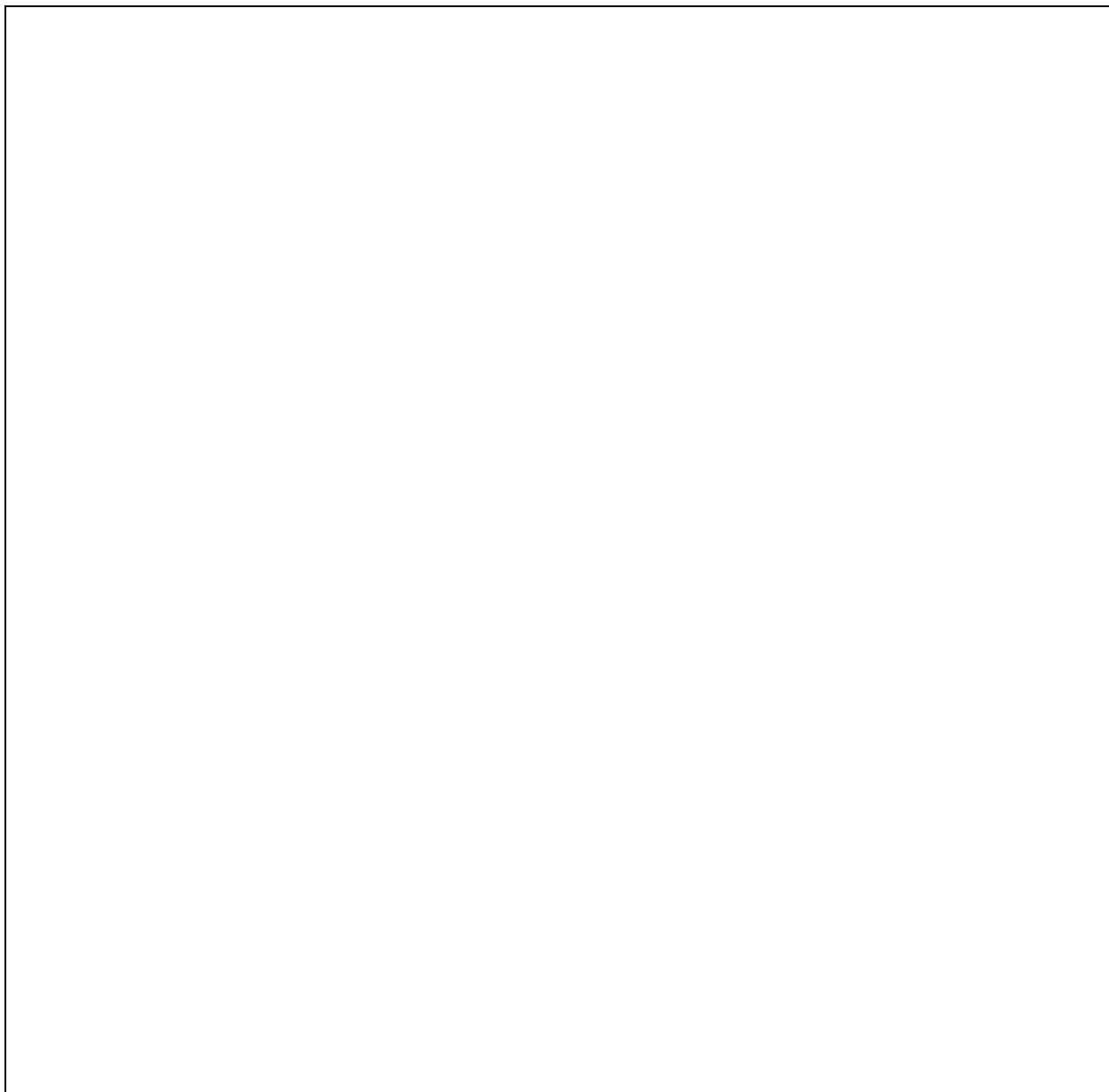
10. feladat	az egész 7%-a		
	10A	10B	Összesen
Max	5	2	7
Elért			

Ismeretes, hogy karbonil csoportok enol-intermediereken keresztül jód(III)-reagenssel (pl. PIDA) aktiválhatóak és így α -helyzetben változatos nukleofilekkel funkcionálizálhatóak. Az alábbi ábra ennek az oxidatív átalakításnak a vázlatos, egyszerűsített mechanizmusát mutatja be:

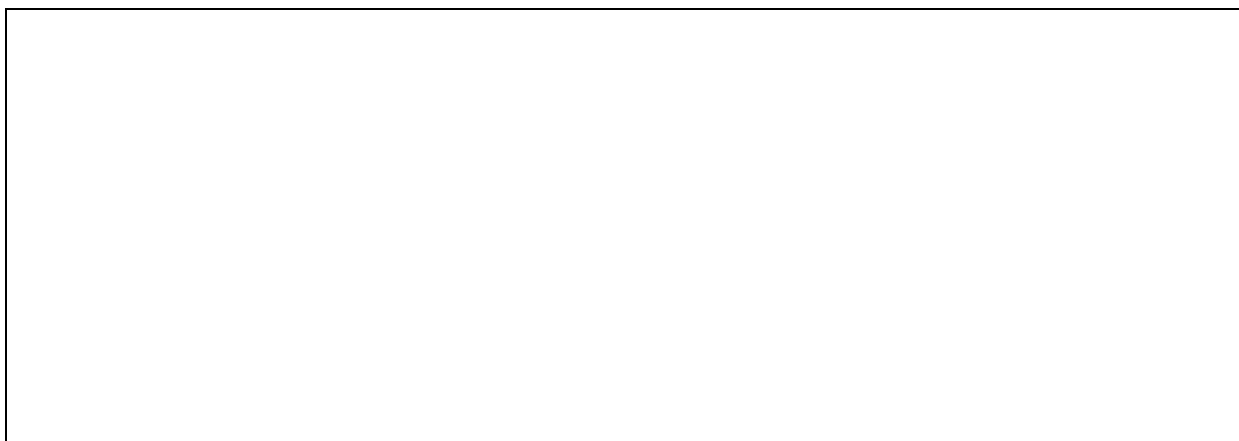


10A. Ezen és saját ismereteid alapján javasolj mechanizmust az alábbi átalakításra, melyet az *atropurpuran* totálszintézisében alkalmaztak!





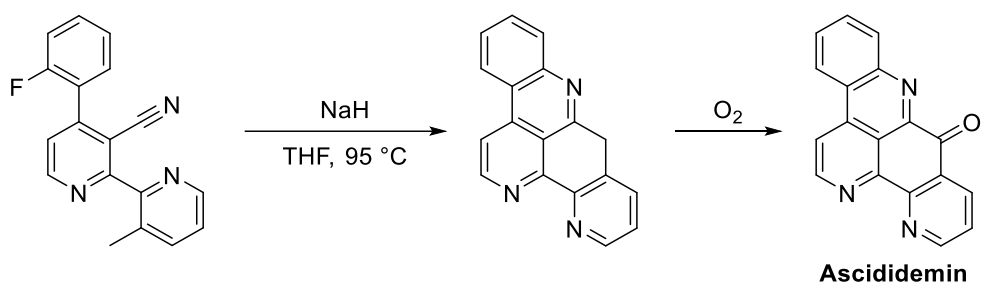
10B. *Javasolj egy várható mellékterméket mechanisztikus magyarázattal! (Több megoldás is elfogadható, de csak egyet javasolj.)*



11. feladat	az egész 7%-a	
	11	Összesen
Max	6	6
Elért		

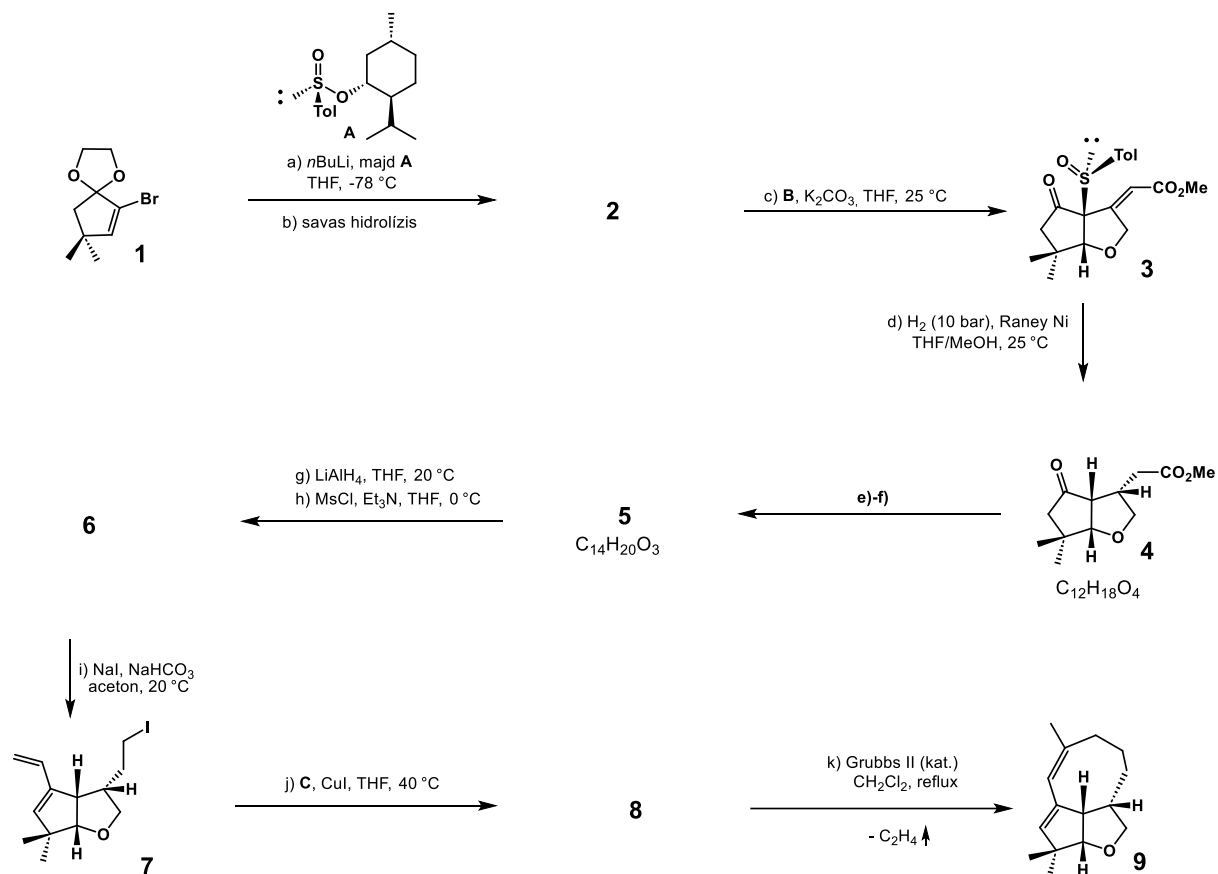
A piroakridinek családjába tartozó ascididemint 1988-ban izolálták egy Japán melletti tengerben élő zsákállatból. A többek között tumorelles hatással is rendelkező vegyületet szintetikusán többen is előállították, számos szintézisstratégiát követve.

Az alábbi ábrán egy dán kutatócsoport szintézisének kulcslépését tüntettük fel. *Javasolj mechanizmust a nátrium-hidrid jelenlétében végbemenő reakcióra!*



12. feladat		az egész 9%-a		
	12A	12B	12C	Összesen
Max	4	4	7	15
Elért				

Az (+)-asteriscanolide-hoz vezető szintézis első lépései láthatók az alábbi ábrán.



12A. Mik lehetnek a B és C reagensek? Rajzold fel a szerkezetüket!

B	C
---	---

12C. Mik lehetnek az **e)** és **f)** átalakítások körülményei? Írd fel őket!

e):

f):

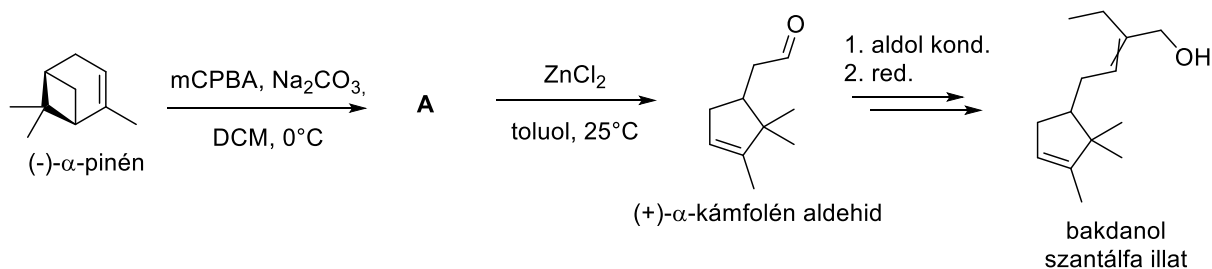
12A. Rajzold fel a **2**, **5**, **6**, és **8** vegyületek szerkezetét! Használj a sztereokémia jelölésére ékeket (—; ·····)!

2	5
6	8

13. feladat			az egész 9%-a		
	13A	13B	13C	13D	Összesen
Max	4	1	1	10	16
Elért					

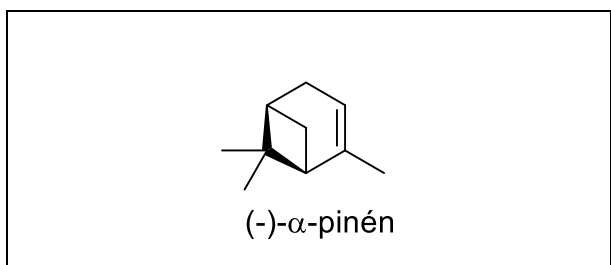
A szintetikus bakdanol illóolaj előállítására (+)-kámfolén aldehid keresztül (-)- α -pinénből indul. Ehhez első lépésben a (-)- α -pinént persavas oxidációval egy reaktív intermedierré alakítják (**A**), majd az intermedierből cink-kloridos kevertetést követően képződik az aldehid.

13A. Rajzold fel az **A** vegyület szerkezetét! Add meg a kiralitás centrumok abszolút konfigurációját a CIP konvenció alapján! Használd a sztereokémia jelölésére ékeket (—; …)!



A

13B. Jelöld a (-)- α -pinén melyik szeterocentruma „örződik meg” a (+)- α -kámfolén aldehidben! Karikázd be!



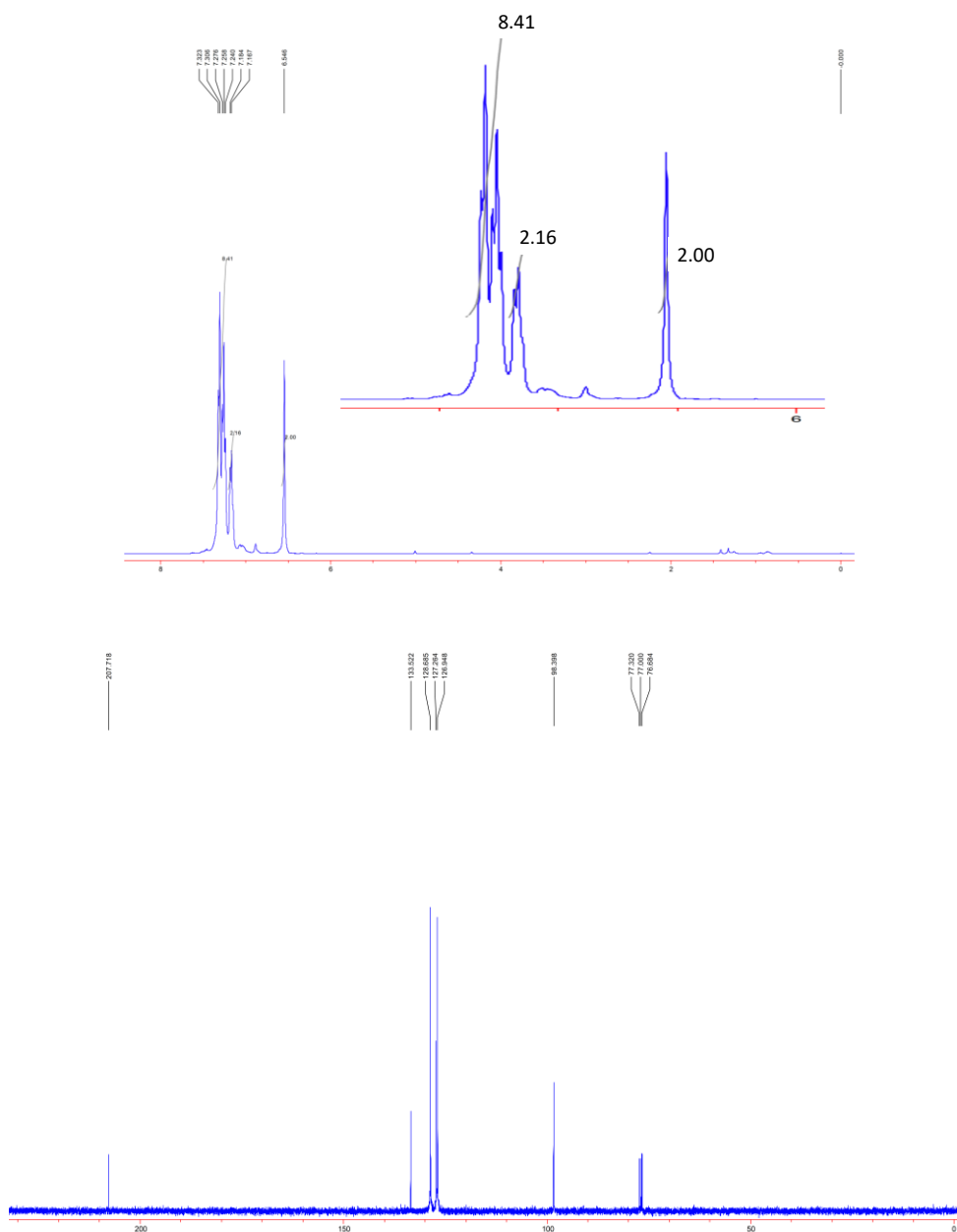
13C. Milyen szerepet játszik a cink-klorid a reakcióban?

13D. Írd fel az **A** köztitermék kámfolén aldehiddé történő átalakulásának mechanizmusát! Jelöld az aldehidben a kiralitás centrum sztereokémiáját, használj a sztereokémia jelölésére ékeket (—; …)!

(Segítség: a szerves kémiai átalakulásokban nem csak új szén-szén, szén-heteroatom kötések alakulhatnak ki, hanem ún. fragmentációs átalakulásokban szén-szén, illetve szén-heteroatom kötések hasadhatnak fel.)

14. feladat	az egész 11%-a		
	14A	14B	Összesen
Max	4	1	5
Elért			

1,1-dibróm-2,3-difenilciklopropánt metil-lítiummal reagáltatva egy kétkomponensű izomerelegyet kapunk, mely elegy a polarizált fény síkját nem forgatja el és hagyományos kromatográfiával nem szétválasztható. A királis kolonnát alkalmazó GCMS-ben két egyforma integrállal rendelkező csúcs jelenik meg, 192-es m/z értékkel. Az NMR-mérések eredménye az alábbi ábrákon látható. A spektrumok $CDCl_3$ oldószerben lettek felvéve. (Az integrál értékek a szokásostól eltérően a jelek mellett találhatóak.)



14A. Rajzold fel a keletkezett két anyag képletét!

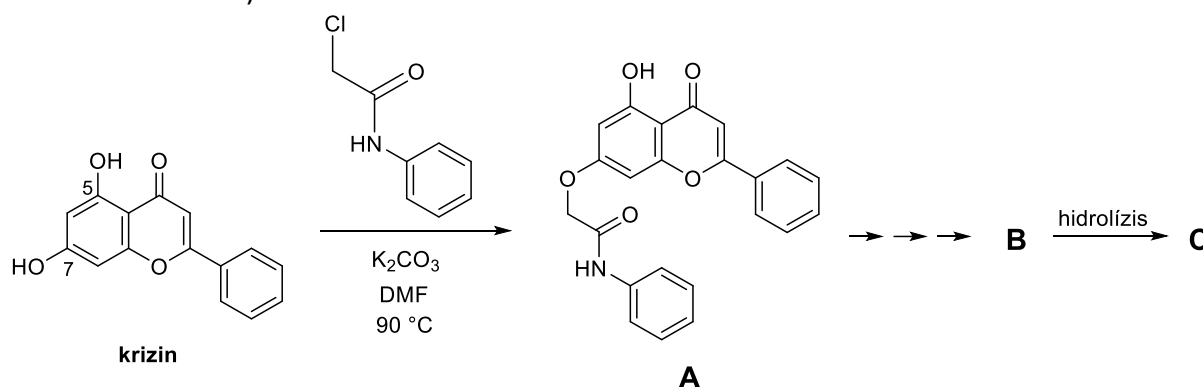
--	--

14B. Mi a keletkezett két anyag egymáshoz való viszonya?

--

15. feladat		az egész 11%-a		
	15A	15B	15C	Összesen
Max	4	5	2	11
Elért				

A krizin nevű flavonoidot 2-klór-N-fenilacetammal reagáltatva DMF oldószerben, ekvimoláris mennyiségű K_2CO_3 jelenlétében, szobahőmérsékleten, jó termeléssel előállítható az **A** termék. A reakcióelegyhez még 1 ekvivalens K_2CO_3 -ot adva és 90 °C-ra melegítve az **A** mennyisége lassan csökkenni kezd, és ezzel párhuzamosan megjelenik a **B** intermedier, amely hidrolízist követően átalakul a **C** végtermékké. (A hidrolízis vízigényét a reakcióhoz használt DMF víztartalma fedezi.)



Az **A**, **B** és **C** vegyületek móltömegei (g/mol): $M_A = 387,38$; $M_B = 387,38$ és $M_C = 329,35$.
 $^1\text{H-NMR}$ alapján a **B** vegyület nem tartalmaz nitrogénatomhoz kapcsolódó hidrogént, míg a **C** termék spektrumában található egy -NH- jel.

15A. Add meg a **B** és **C** vegyületek szerkezetét!

B	C
----------	----------

15B. *Tegyél javaslatot az $A \rightarrow B$ átrendeződés mechanizmusára, és írd fel a köztitermékek szerkezetét!*

15C. *Magyarád meg, hogy az ekvimoláris mennyiségű 2-klór-N-fenilacetamiddel történő O-alkilezés miatt regioszelektíven csak a krizin 7-es helyzetében játszódik le, míg az 5-ös helyzetű hidroxilcsoport nem reagál az adott körülmények között!*