



64-oji Lietuvos mokinių chemijos olimpiada  
Vilnius, vasario 26-28 d. 2026

## Teorinės užduotys

IIIg ir IVg (11 ir 12) klasės

	Psl.	Taškų skaičius
Periodinė lentelė	3	
Konstantos ir formulės	4	
1 užduotis. Apšilimas	5	7
2 užduotis. Ličio jonų baterijos	8	8
3 užduotis. Cinko sulfidas	8	9
4 užduotis. Nukąsto laipsnio polimerizacija	12	8
5 užduotis. Kvapų ir policiklų pasaulis	14	10
6 užduotis. Ne(mėnulio) fazė	15	9
7 užduotis. Keisti olefinai	18	9
8 užduotis. Aminopolikarboksirūgštys	20	10

Iš viso 70 taškų

## Užduotis sukūrė:

Aurimas Vyšniauskas

Einaras Sipavičius

Artūras Makselis

Delianas Palinauskas

Vidmantas Bieliūnas

Filipas Ambrulevičius

Rimantas Raudonis

Deimantas Šmigelskas

Bendrieji nurodymai teorijos sprendimų metu:

- Užduočių sprendimui skirtos 5 valandos.
- Galite naudotis rašymo priemonėmis, skaičiuotuvais, braižymo priemonėmis ir periodinėmis lentelėmis, kurias gavote registracijos metu.
- Atsakymus rašykite tušinuku/parkeriu. Nepalikite parašymų pieštuku.
- Sprendimų metu galite turėti lengvų užkandžių, atsigerti.
- Juodraščiui naudokite atskirus tuščius lapus.
- Net jei užduotis neprašo, pateikite visus tarpinius skaičiavimus.
- Užduočių sprendimo metu tarpusavyje bendrauti griežtai draudžiama.
- Jei užsimanysite į tualetą, pakelkite ranką ir prižiūrėtojas jus palydės.
- Nepamirškite užsirašyti/užsiklijuoti lipduko su dalyvio kodu atsakymų lapų viršelyje tam skirtoje vietoje.
- Telefonas privalu laikyti kuprinėse/krepšiuose. Telefonais naudotis griežtai draudžiama!
- Prižiūrėtojai informuoja iki sprendimų pabaigos likus 2 val, 1 val, 30 min, 10 min.
- Jei turėsite klausimų, pakelkite ranką ir prižiūrėtojas prieis.

## Periodinè lentelè

1																	18			
1 H 1.008	2														13	14	15	16	17	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 24.31	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 -

## Konstantos ir formulės

Avogadro konstanta	$N_A = 6,02214 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	Kinetinė lygtis	$v = k [A]^m [B]^n \dots$
Universaliaji dujų konstanta	$R = 8,3145 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,083145 \text{ L} \cdot \text{bar} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$	Pirmojo laipsnio integruotoji kinetinė lygtis	$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -kt$
Standartinis slėgis	$p^\circ = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$	Pusėjimo trukmė	$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$
1 atm slėgis	760 mmHg = 101325 Pa	Antrojo laipsnio integruotoji kinetinė lygtis	$\frac{1}{[A]_t} - \frac{1}{[A]_0} = kt$
Idealiųjų dujų lygtis	$pV = nRT$	Pusėjimo trukmė	$t_{1/2} = \frac{1}{k[A]_0}$
	$\frac{p_1 V_1}{n_1 T_1} = \frac{p_2 V_2}{n_2 T_2}$	Arenijaus (Arrhenius) lygtis	$k = A \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right)$
$\chi_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2 + \dots} = \frac{p_1}{p_1 + p_2 + \dots}$		$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$	
Dujų plėtimosi darbas esant pastoviam išoriniam slėgiui	$A = -p\Delta V$	Entalpijos pokytis	$\Delta H^\circ = \Delta U^\circ + p\Delta V$
Grįžtamojo dujų plėtimosi darbas	$A = nRT \ln \frac{p_2}{p_1}$	Gibso energijos pokytis	$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$
Lamberto-Bero (Lambert-Beer) dėsnis	$A = lg \frac{I_0}{I} = \epsilon cl$	$\Delta_r H^\circ = \sum \nu \Delta_f H^\circ (prod) - \sum \nu \Delta_f H^\circ (reag)$	
Atominės masės vienetas	1 u = 1,66054 · 10 <sup>-27</sup> kg	$\Delta_r G^\circ = \sum \nu \Delta_f G^\circ (prod) - \sum \nu \Delta_f G^\circ (reag)$	
Elektrono masė	$m_e = 9,10938 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	$\Delta_r S^\circ = \sum \nu S^\circ (prod) - \sum \nu S^\circ (reag)$	
Planko (Planck) konstanta	$h = 6,62608 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$	$a A(aq) + b B(aq) \rightleftharpoons c C(aq) + d D(aq)$	
Šviesos greitis	$c = 2,99793 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$	$Q_r = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$	
Bolcmano (Boltzmann) konstanta	$k_B = 1,38065 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$	$\Delta_r G = \Delta_r G^\circ + RT \ln Q_r$	
Kvanto energija	$E = h\nu$	$\Delta_r G^\circ = -RT \ln K = -nFE^\circ_{cel}$	
Elektromagnetinės bangos ilgio ir dažnio sąryšis	$\lambda \cdot \nu = c$	Nernsto lygtis	$E = E^\circ - \frac{RT}{nF} \ln Q_r$
Bangos skaičius	$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$	Faradėjaus konstanta (Faraday)	$F = 96485 \text{ C mol}^{-1}$
1 eV 1 eV/atomui	1,60218 · 10 <sup>-19</sup> J 96,4853 kJ/mol	$\ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{\Delta H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$	
$pH = -lg[H^+]$	$pH = pK_a + lg \frac{[B]}{[R]}$	$K_a \times K_b = K_w$	$K_p = K_c (RT)^{\Delta \nu_{dujų}}$

## 1 užduotis. Apšilimas

Parašykite atsakymą arba pasirinkite teisingą atsakymo variantą.

**1.1.** Pipete, kurios paklaida  $\pm 0,01 \text{ cm}^3$ , paimta  $25,00 \text{ cm}^3$  tirpalo ir supilta į svėrimo indą. Tirpalo mėginio masė  $26,4436 \text{ g}$  (svarstyklių paklaida  $\pm 0,0001 \text{ g}$ ). Apskaičiuokite tirpalo tankį, išreikštą  $\text{g/cm}^3$ . Atsakymą parašykite palikdami tik reikšminius skaitmenis.

**1.2.** Sacharozės  $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$  koncentracija tirpale yra  $1,20 \cdot 10^{21}$  molekulių/ $\text{cm}^3$ . Apskaičiuokite sacharozės molinę koncentraciją, išreikštą mol/L. Atsakymą parašykite palikdami tik reikšminius skaitmenis.

**1.3.** Geležies savitoji šiluminė talpa (savitoji šiluma) yra  $0,450 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ . Kiek energijos sunaudojama  $10,0 \text{ g}$  geležies temperatūrą padidinant  $15,0 \text{ }^\circ\text{C}$ ? Atsakymą išreikškite džauliais. Atsakymą parašykite palikdami tik reikšminius skaitmenis.

**1.4.** Elementas X sudaro oksidą  $\text{X}_2\text{O}_5$ . Elemento X masės dalis šiame okside sudaro  $43,64 \%$ . Parašykite X elemento cheminį simbolį.

**1.5.** Kas yra oksiduojama vykstant reakcijai:  $2\text{Ag}^+(\text{aq}) + \text{Cu}(\text{s}) \rightarrow 2\text{Ag}(\text{s}) + \text{Cu}^{2+}(\text{aq})$ ?

A  $\text{Ag}^+$       B Cu      C Ag      D  $\text{Cu}^{2+}$

**1.6.** Kurio iš nurodytų atomų spindulys yra mažiausias?

A Mg      B Al      C Si      D P

**1.7.** Kurio iš nurodytų atomų pirmoji jonizacijos energija yra mažiausia?

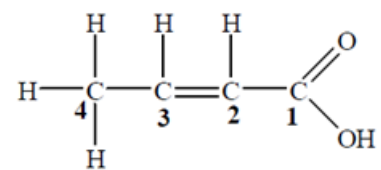
A Mg      B Al      C Si      D P

**1.8.** Kurioje molekulėje yra delokalizuotų  $\pi$  elektronų?

A CO      B  $\text{CO}_2$       C  $\text{O}_3$       D HCN

**1.9.** Kuriuo atveju teisingai nurodyta atitinkamais numeriais pažymėtų anglies atomų hibridizacija?

	1	2	3	4
A	$\text{sp}^2$	$\text{sp}^2$	$\text{sp}^2$	$\text{sp}^3$
B	sp	$\text{sp}^2$	$\text{sp}^2$	$\text{sp}^2$
C	sp	$\text{sp}^2$	sp	$\text{sp}^3$
D	$\text{sp}^2$	sp	$\text{sp}^2$	$\text{sp}^3$



**1.10.** Kuriame medžiagos mėginyje daugiausia atomų?

A  $1,0 \text{ mol C}_3\text{H}_8$       B  $2,0 \text{ mol C}_2\text{H}_6$       C  $5,0 \text{ mol NH}_3$       D  $6,0 \text{ mol H}_2\text{O}$

**1.11.** Gamtinio bromo masių spektre matomi stulpeliai, atitinkantys masės ir krūvio santykį  $m/z$ , lygų 79, 81, 158, 160 ir 162. Kelių izotopų mišinys yra gamtinis bromas?

A 2      B 3      C 4      D 5

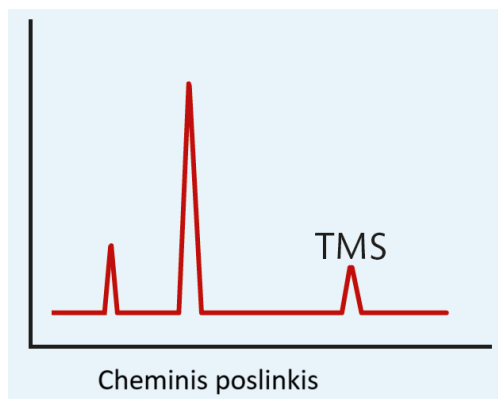
1.12. Paveiksle pateiktas supaprastintas mažos skiriamosios gebos  $^1\text{H}$  BMR spektras. Kurio junginio šis spektras?

A  $\text{C}_2\text{H}_6$

B  $\text{CH}_3\text{OH}$

C  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

D  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$



1.13. Kurios nuosėdos ištirpsta įpylus azoto rūgšties tirpalo?

A  $\text{AgCl(k)}$

B  $\text{Ag}_3\text{PO}_4(\text{k})$

C  $\text{BaSO}_4(\text{k})$

D Visos čia išvardytos

1.14. Kurios iš nurodytų medžiagų virimo temperatūra 1 baro slėgyje yra pati aukščiausia?

A  $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{O} - \text{CH}_3$

B  $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$

C  $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CHO}$

D  $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{OH}$

1.15. Kurios iš nurodytų medžiagų virimo temperatūra 1 baro slėgyje yra pati aukščiausia?

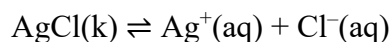
A Heptano

B 3-metilheksano

C 2,3-dimetilpentano

D 2,2,3-trimetilbutano

1.16. Į vandenį įbėrus sidabro chlorido nusistovėjo cheminė pusiausvyra:



Kokiu atveju pusiausviroji sidabro jonų koncentracija tirpale sumažės?

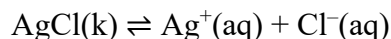
A Išėmus iš tirpalo dalį  $\text{AgCl(k)}$

B Įbėrus į tirpalą papildomai  $\text{AgCl(k)}$

C Įbėrus  $\text{KCl(k)}$  ir ištirpinus

D Įbėrus  $\text{KNO}_3(\text{k})$  ir ištirpinus

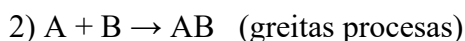
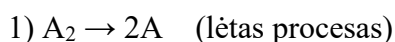
1.17. Į vandenį įbėrus sidabro chlorido nusistovėjo cheminė pusiausvyra:



Kokiu atveju pusiausviroji sidabro jonų koncentracija tirpale padidės?

- A Išėmus iš tirpalo dalį  $\text{AgCl}(k)$
- B Įbėrus į tirpalą papildomai  $\text{AgCl}(k)$
- C Įbėrus  $\text{KCl}(k)$  ir ištirpinus
- D Įbėrus  $\text{KNO}_3(k)$  ir ištirpinus

1.18. Ištyrus reakciją  $\text{A}_2 + 2\text{B} \rightarrow 2\text{AB}$  paaiškėjo, kad ji vyksta dviem etapais:



Šios reakcijos kinetinė (reakcijos greičio priklausomybės nuo reagentų koncentracijos) lygtis yra

- A  $v = k \cdot c(\text{A}_2) \cdot c^2(\text{B})$
- B  $v = k \cdot c^2(\text{B})$
- C  $v = k \cdot c(\text{A}_2)$
- D  $v = k \cdot c^2(\text{AB})$

1.19. Amoniakio molinė koncentracija vandeniniame tirpale 0,010 mol/L. Šio tirpalo vandenilio jonų rodiklis pH yra

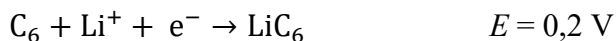
- A Didesnis už 7 bet mažesnis už 12
- B Didesnis už 2 bet mažesnis už 7
- C Apytiksliai lygus 2
- D Apytiksliai lygus 12

1.20. Kuriuo atveju junginiai išrikiuoti jų 0,10 mol/L koncentracijos tirpalo pH didėjimo tvarka?

- A  $\text{CH}_3\text{COOH} < \text{HNO}_3 < \text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2 < \text{KOH}$
- B  $\text{KOH} < \text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2 < \text{CH}_3\text{COOH} < \text{HNO}_3$
- C  $\text{HNO}_3 < \text{CH}_3\text{COOH} < \text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2 < \text{KOH}$
- D  $\text{HNO}_3 < \text{CH}_3\text{COOH} < \text{KOH} < \text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$

## 2 užduotis. Ličio jonų baterijos

Ličio jonų baterijos yra itin plačiai naudojamos dėl savo ilgaamžiškumo, didelio energijos tankio ir efektyvumo. Pagrindinės joje naudojamos medžiagos yra grafitas ir kobalto oksidas. Žemiau pateiktos dalinės redukcijos lygtys kartu su redukcijos potencialais ličio jonų baterijai:



1 pav. Ličio jonų baterija.

**2.1.** Užrašykite reakcijos, vykstančios baterijoje telefono naudojimo metu, lygtį.

**2.2.** Kuri medžiaga yra prie katodo, kai a) baterija visiškai išsikrovusi b) baterija visiškai įkrauta?

**2.3.** Kokį ženklą (+ ar -) turės elektrodas prie  $\text{CoO}_2$  a) bateriją iškraunant b) bateriją įkraunant?

**2.4.** Išvardinkite vieną iš pagrindinių ličio jonų baterijos privalumų, nepaminėtų sąlygoje.

Tipinė išmanaus telefono ličio jonų baterijos talpa yra 5000 mAh.  $1 \text{ mAh} = 3,6 \text{ C}$ .

**2.5.** Apskaičiuokite, kokia Li masė nukeliaus nuo vieno baterijos elektrodo iki kito pilnai išsikrovus baterijai.

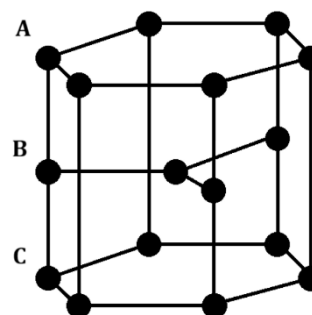
Ir grafitas, ir kobalto(IV) oksidas yra panašios struktūros – susideda iš plonų anglies arba kobalto oksido sluoksnių. Litis tarp tų sluoksnių įsiterpia (interkaluoja).

**2.6.** Pasvarstykite, ar jonų baterija veiktų geriau, jei litį joje pakeistume kitu metalu, sudarančiu stipresnius ryšius su kobalto(IV) oksido ir grafito sluoksniais abiejų elektrodų atveju.

Grafito, interkaluoto su kaliumu, empirinė formulė yra  $\text{KC}_8$ . Tai labai nestabilus junginys, pasižymintis superlaidumo savybėmis itin žemose temperatūrose. Jei lyginame  $\text{LiC}_6$  ir  $\text{KC}_8$  struktūras, atstumas tarp grafito sluoksnių padidėja nuo 370 pm iki 535 pm.

**2.7.** Apskaičiuokite  $\text{KC}_8$  tankį ( $\text{g/cm}^3$ ). Laikykite, kad anglies sluoksnio struktūra išlieka nepakitusi neskaitant padidėjusio atstumo tarp sluoksnių.  $\text{LiC}_6$  tankis yra  $2,2 \text{ g/cm}^3$ .

Dešinėje pateikta sluoksniuota paprasto grafito kristalinė struktūra. Viename sluoksnyje anglies atomai išsidėsto taisyklingo šešiakampio geometrija (2 pav.). Ryšio ilgis tarp C atomų tame pačiame sluoksnyje yra 142 pm.



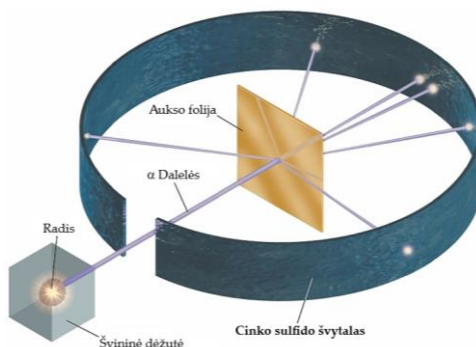
2 pav. Grafito struktūra.

**2.8.** Naudodamiesi pateikta diagrama, grafito tankiu ( $2,3 \text{ g/cm}^3$ ) ir ryšio ilgiu tarp C atomų tame pačiame sluoksnyje, apskaičiuokite atstumą tarp grafito sluoksnių.

## 3 užduotis. Cinko sulfidas

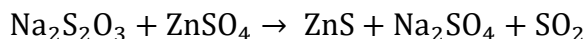
Ernesto Rezerfordo (*Ernest Rutherford*) mokslinė komanda, Hansas Geigeris (*Johannes Geiger*) ir Ernestas Marsden (*Ernest Marsden*) 1906-1913 m. atliko svarbius eksperimentus, kurie lėmė branduolinio atomo modelio atsiradimą (vėliau šis atomo modelis pakeistas kvantiniu).

Rezerfordo-Geigerio-Marsden eksperimento metu (žr. 1 pav). aukso folijos lapelis buvo apšaudytas  $\alpha$  dalelėmis (He branduoliais). Pro aukso folijos lapelius praskriejusios  $\alpha$  dalelės buvo registruojamos cinko sulfido (ZnS) švytalu.

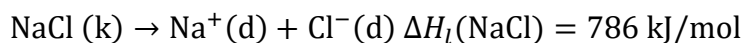


1 pav. Rezerfordo eksperimentas.

3.1. Išlyginkite cinko sulfido susidarymo reakcijos lygtį.



Pirmiausia panagrinėkime ZnS susidarymo energetinius aspektus. Gardelės entalpija ( $\Delta H_l$ ) yra energijos kiekis, reikalingas suardyti 1 mol kietos fazės joninio kristalinio junginio iš jo suformuojant dujinės fazės jonus. Pavyzdžiui:



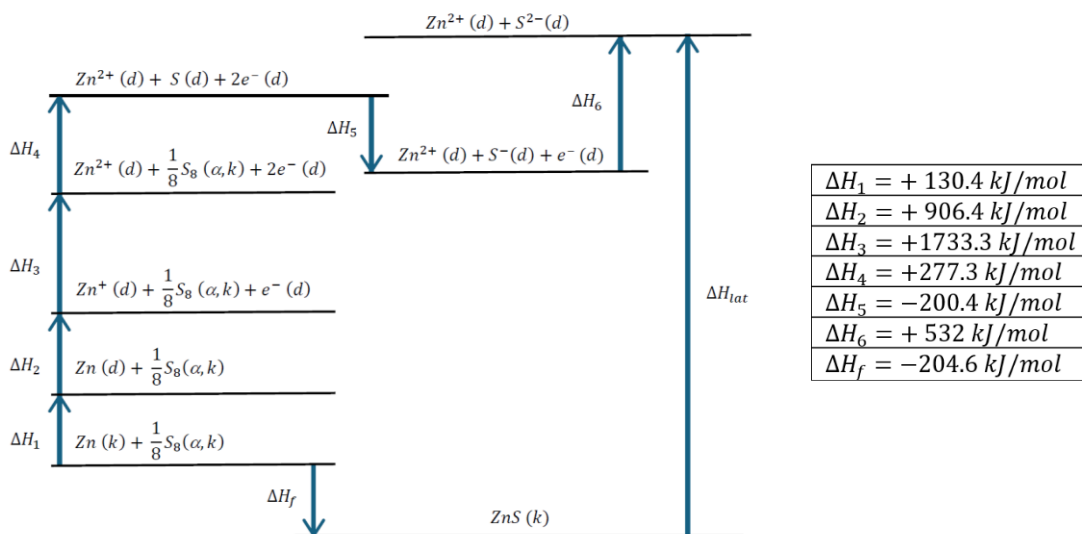
Kadangi gardelės entalpijos eksperimentiškai nustatyti negalima, ji apskaičiuojama remiantis Borno-Haberio ciklu, kuris yra paremtas Heso dėsniumi. Borno-Haberio ciklo sudarymui reikia žinoti eksperimentiškai nustatytas šių energetinių virsmų entalpijas:

- Atomizacijos entalpija ( $\Delta H_{atm}$ )
- Sublimacijos entalpija ( $\Delta H_{sub}$ )
- Pirma/antra elektrono giminiškumo entalpija ( $E_A$ )
- Pirma/antra jonizacijos energijos ( $E_I$ )
- Susidarymo entalpija ( $\Delta H_f$ )

3.2. Susiekite energetinius virsmus su duotosiomis reakcijų lygtimis.

$\text{Zn (k)} \rightarrow \text{Zn (d)}$	
$\text{S}_8 (\text{k}) \rightarrow 8 \text{S (d)}$	
$\text{Zn (d)} \rightarrow \text{Zn}^+(\text{d}) + \text{e}^-(\text{d})$	
$\text{Zn}^+(\text{d}) \rightarrow \text{Zn}^{2+}(\text{d}) + \text{e}^-(\text{d})$	
$\text{S (d)} + \text{e}^-(\text{d}) \rightarrow \text{S}^-(\text{d})$	
$\text{S}^-(\text{d}) + \text{e}^-(\text{d}) \rightarrow \text{S}^{2-}(\text{d})$	

3.3. Remdamiesi pateiktais duomenimis ir ZnS Borno-Haberio ciklu apskaičiuokite  $\Delta H_f(\text{ZnS})$ .



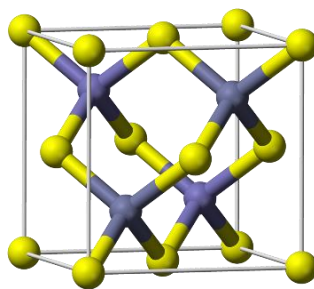
2 pav. ZnS Borno-Haberio ciklas.

3.4. Kodėl  $\Delta H_f(\text{ZnS})$  apskaičiavimui yra naudojamas  $\alpha$ -sieros (rombinės sieros) entalpijos pokytis?

- $\alpha$ -Siera yra plačiausiai žemėje paplitusi sieros alotropinė atmaina.
- $\alpha$ -Siera yra stabiliausia sieros alotropinė atmaina standartinėmis sąlygomis.
- $\alpha$ -Siera yra reaktyviausia sieros alotropinė atmaina standartinėmis sąlygomis.
- $\alpha$ -Siera yra pagrindinė sieros alotropinė atmaina cheminėje sintezėje ir pramonėje.

3.5. Pastebėkite, kad antro elektrono prijungimas prie  $S^-$ , yra energetiškai nepalankus lyginant su pirmojo elektrono prisijungimu ( $\Delta H_6 \gg \Delta H_5$ ). Paaiškinkite kodėl.

ZnS turi dvi pagrindines kristalines formas. Dažniausiai gamtoje randama ir stabiliausia ZnS forma yra vadinamasis sfaleritas.



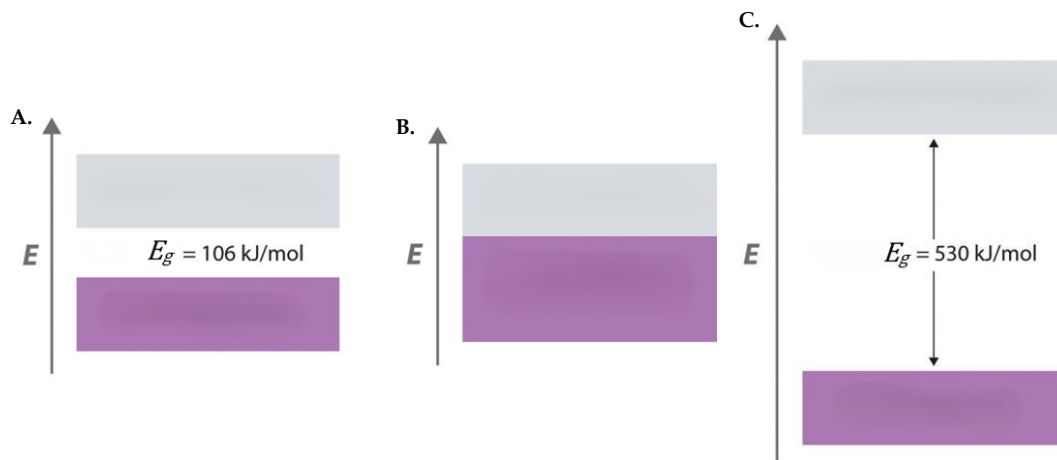
3 pav. Sfalerito kristalinė gardelė. Geltona spalva pažymėti  $S^{2-}$ , o pilka –  $Zn^{2+}$  jonai.

3.6. Sfalerito gardelė yra kubinė, o jos briaunos ilgis lygus  $5.406 \text{ \AA}$ . Koks yra sfalerito tankis ( $\text{g/cm}^3$ )? (Pastaba:  $1 \text{ \AA} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ )

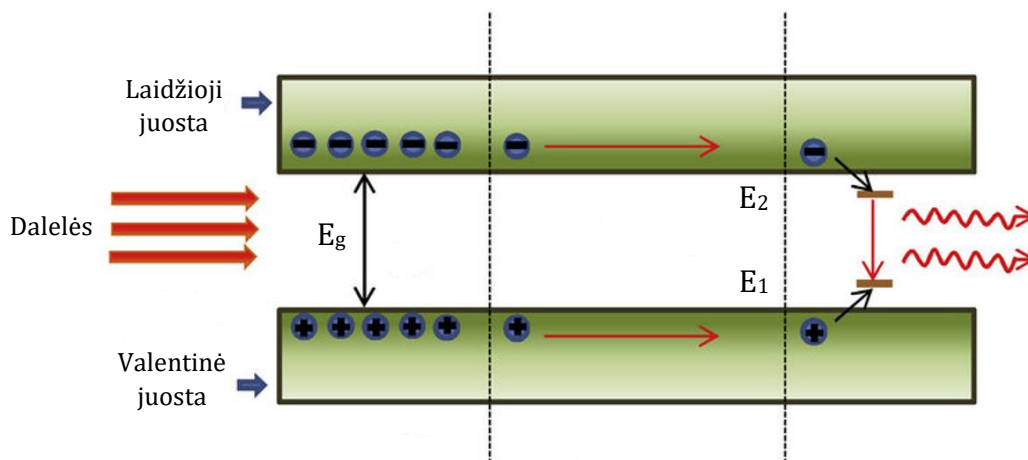
Atomuose elektronai pildo atomines orbitales (AOs). Molekulėse elektronai pasiskirsto molekulinėse orbitalėse (MOs), o kietuosiuose kūnuose – juostose. Elektroninės juostos susidaro, kai kietojo kūno atomai suartėja, o AOs pradeda sąveikauti ir pradeda formuotis MOs su naujais energetiniais lygmenimis. Kadangi kietuosius kūnus sudaro labai didelis skaičius atomų, tai MO energetiniai lygmenys išsidėsto taip tankiai, kad susiformuoja beveik tolydinė energetinė juosta. Žemiausios energijos juosta, užpildyta elektronais, yra vadinama valentine juosta (molekulėse – HOMO atitiktumu). Aukščiausios energijos juosta, esanti virš

valentinės juostos ir neužpildyta elektronais, yra vadinama laidumo juosta (molekulėse – LUMO atitimuo). Energijos skirtumas tarp valentinės juostos ir laidumo juostos vadinamas draustine juosta ( $E_g$ ).

3.7. Juostų teorija yra aiškinamas kietųjų kūnų laidumas elektrai. Kuri energijos diagrama yra laidininko, puslaidininkio ir izoliatoriaus?



Rezerfordo išnaudota ZnS savybė – scintiliacija – taip pat gali būti paaiškinta remiantis juostinėmis diagramomis. ZnS su Ag arba Cu priemaišomis (aktyvatoriais) juostinėje diagramoje galime pastebėti papildomus tarpjuostinius aktyvatoriaus energetinius lygius ( $E_1$  ir  $E_2$ ). Kai  $\alpha$ -dalelė suteikia valentinės juostos elektronams energijos, jie peršoka į laidumo juostą, o valentinėje juostoje susidaro skylė. Tuomet elektronas pereina į sužadintą aktyvatoriaus energetinį lygmenį ( $E_2$ ). Galiausiai elektronas pereina iš sužadinto aktyvatoriaus lygio ( $E_2$ ) į nesužadinto aktyvatoriaus lygį ( $E_1$ ).



3.8. Žinoma, kad elektronui tiesiogiai pereinant iš laidžiosios į valentinę juostą ( $\Delta E = E_g$ ) yra išspinduliuojamas UV fotonas. Kokio bangos ilgio (didesnio ar mažesnio) fotonus išskirs ZnS su Ag arba Cu priemaišomis, kai elektronas pereis iš tarpjuostinio sužadinto aktyvatoriaus lygmens į nesužadinto aktyvatoriaus lygį? Kodėl?

3.9. Pastebėta, kad ZnS su Ag priemaišomis scintiliatorius išskiria 450 nm fotonus. Apskaičiuokite tarpjuostinių lygmenų energijos skirtumą eV.

## 4 užduotis. Nukąsto laipsnio polimerizacija

Cheminės kinetikos ir GPC (gelio prasiskverbimo chromatografijos, angl. *gel permeation chromatography*) taikymas leidžia tyrėjams užpildyti spragas tarp mikroskopinių molekulių procesų ir makroskopinių medžiagos savybių. Kol cheminė kinetika suteikia matematinį pagrindą stebėti monomerų sunaudojimą bei polimerizacijos iniciacijos greitį, GPC veikia kaip fizinis šių įvykių metraštis, suskirstydamas susidariusias polimerų grandines pagal jų dydį.

Petriukas atliko keletą polimerizacijos reakcijos eksperimentų. Gautus polimerus jis ištirpino ir atliko GPC analizę. GPC analizės metu stambios molekulės per chromatografinę kolonėlę keliauja greičiau nei mažos, nes jos netelpa į užpildyto dalelių poras. Tokiu būdu GPC metu molekulės yra atskiriamos pagal dydį. Dažnai GPC metodas naudojamas polimerų charakterizavimui, t. y. dydžio ar molekulinės masės nustatymui. Tam dažnai naudojama ši lygtis:

$$\log_{10}(M) = A - B V_E$$

kur  $M$  – analizuojamo junginio molinė masė,  $A$  – teorinis laisvasis kolonėlės tūris, t. y. tūris sorbento porose, prieinamas mažoms molekulėms,  $B$  – teigiama konstanta, o  $V_E$  – elucijos tūris (tūris, pratekantis per chromatografinę kolonėlę iki kol išeina medžiaga).

**1 lentelė.** Petriuko atlikto polimerizacijos eksperimento duomenys.

Mėginio nr.	$[M]_0$ mol/L	$[I]_0$ mol/L	$t_R$ , min	Tėkmės greitis mL/min	$V_E$ , mL	$M$ , g/mol
1	6,000	0,0001	6,2365	1,000		
2	7,000	0,0001	6,1528			
3	8,000	0,0001	6,0803			
4	8,000	0,0003	6,3785			
5	8,000	0,0009	6,6767			
6	8,000	0,0027	6,9749			
7	8,000	0,0081	7,2731			
Standartas 1	-	-	9,8903			1224
Standartas 2	-	-	5,5749			3468000
Monomeras	-	-	11,2279			104,15

čia  $[M]_0$  – monomero koncentracija laike  $t = 0$ ,  $[I]_0$  – iniciatoriaus koncentracija laike  $t = 0$ ,  $t_R$  – sulaikymo laikas.

**4.1.** Apskaičiuokite junginių molinę masę 1–7 mėginiuose. Paprastumo dėlei laikykite, kad polimerizacijos metu susidaręs produktas yra monodispersiškas, polimerizacija įvyksta greitai, o chromatografinės smailės yra labai siauros.

Petriukas mano, kad jo vykdoma polimerizacijos reakcija vyksta pagal šį mechanizmą:

- I.  $I \xrightarrow{k_a} 2R^\bullet$  Inicatoriaus skilimas
- II.  $R^\bullet + M \xrightarrow{k_a} R-M^\bullet$  Polimero grandinės augimo iniciacija
- III.  $M_n^\bullet + M \xrightarrow{k_p} M_{n+1}^\bullet$  Polimero grandinės augimas (polimerizacijos greitis)
- IV.  $M_n^\bullet + M_m^\bullet \xrightarrow{k_t} M_{n+m}$  Polimero grandinių kombinacija

Spręsdami uždavinius darykite prielaidas, kad:

- radikalų koncentracija nekinta laike, todėl inicijavimo greitis yra lygus grandinės nutrūkimo greičiui;
- greičio konstantos  $k_p$  ir  $k_t$  nepriklauso nuo grandinės ilgio ( $n$ ,  $m$ ) ir yra nulemiamos tik cheminės radikalo galinės grupės prigimties.

**4.2.** Padėkite Petriukui užrašyti kiekvienos stadijos kinetines greičio lygtis (reaguojančių medžiagų sunaudojimo arba produktų susidarymo greičius). Kuri stadija yra greitį ribojanti ir kodėl? *Pastaba: greičio lygtyse galite naudoti nestabilių dalelių (radikalų) koncentracijas.*

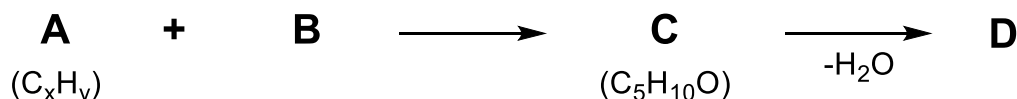
**4.3.** Iniciacijos greitis apibūdina, kiek naujų polimero grandinių inicijuojama per laiko vienetą. Polimerizacijos greitis parodo, kiek monomero molekulių sureaguoja per laiko vienetą. Naudodamiesi kinetinėmis lygtimis išveskite ir užrašykite matematinę išraišką, rodančią, kaip vidutinė polimero molekulinė masė priklauso nuo inicatoriaus ir monomero koncentracijų. Turėkite omenyje, kad pagal mechanizmą, nurodytą 3 dalyje, visų polimero grandinių augimas pasibaigia kombinacijos būdu.

**4.4.** Taikydami stacionariųjų būsenų prielaidą reaktyviems radikalams, išveskite išraišką, rodančią, kad polimero molinė masė yra tiesiogiai proporcinga monomero koncentracijai ir atvirkščiai proporcinga inicatoriaus koncentracijai, pakeltai  $\frac{1}{2}$  laipsniu.

**4.5.** Remdamiesi reakcijos mechanizmu ir prielaidomis, padėkite Petriukui įsitikinti, ar jo pasiūlytas reakcijos mechanizmas dera su atliktų eksperimentų rezultatais. Atsakymą pagrįskite pateikdami grafiką(-us).

## 5 užduotis. Kvapų ir policiklų pasaulis

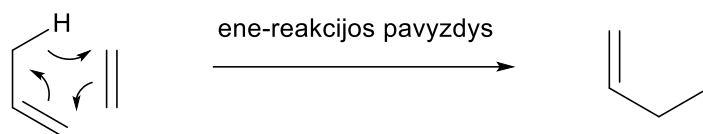
Pušis, citrinas, čiobreliai, mėtas ir daugelį kitų kvapnių augalų sieja viena bendra molekulė **D**. Įvairūs mažamolekuliniai jos oligomerai – terpenai ir terpenoidai – pasižymi intensyviu ir charakteringu aromatu ir sudaro reikšmingą atitinkamų augalų eterinių aliejų dalį. Vienas iš pramoninių **D** sintezės kelių pavaizduotas žemiau.



**5.1.** Pasirinkite angliavandenilio **A** struktūrinę formulę, jei yra žinoma, kad jo  $^1\text{H}$  BMR spektre stebimi du signalai, kurių intensyvumų santykis 1 : 3 ir šis junginys geba prisijungti vieną ekvivalentą HBr.

**5.2.** Normaliomis sąlygomis dujinis junginys **B** įprastai sutinkamas vandeninio tirpalo formoje. Sumaišyta su amoniakiniu sidabro oksido tirpalu ši medžiaga išsodina metalinį sidabrą (sidabro veidrodžio reakcija), o visiškai suoksidavus vieną molį šio junginio susidaro 22,7 L anglies dioksido (STP sąlygomis). Pavaizduokite junginio **B** struktūrinę formulę.

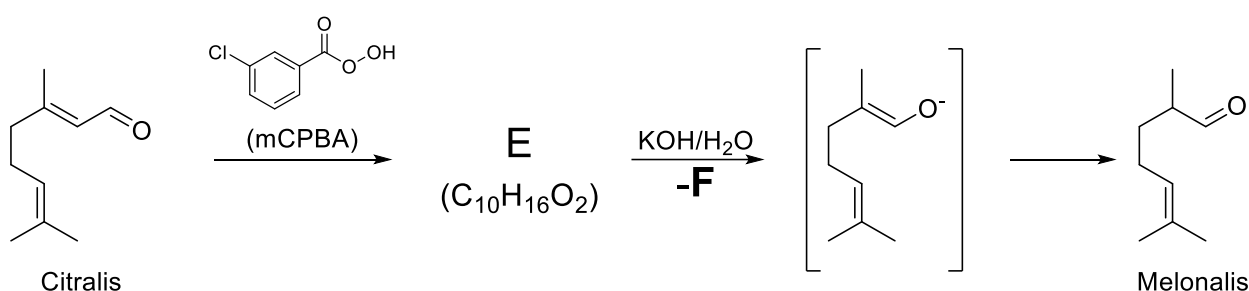
**5.3.** Junginys **C** susidaro medžiagoms **A** ir **B** jungiantis periciklinės ene-reakcijos metu, kuriai būdinga 1,5-vandenilio migracija. Pavaizduokite **C** struktūrinę formulę (reakcijos metu kitos molekulės nesusidaro).



**5.4.** Junginys **C** virsta junginiu **D** dehidratacijos reakcijos metu. Iš pateikto sąrašo išsirinkite tinkamas šios reakcijos sąlygas (galimi keli teisingi variantai).

**5.5.** Pateikite junginio **D** molekulinę ir struktūrinę formulę.

Terpenai ir terpenoidai tai junginių klasė, apimanti daugiau nei 30000 žinomų gamtinių junginių. Paprastieji terpen(oid)ai nėra tik kvapiosios medžiagos. Jie dažnai naudojami kaip pradiniai junginiai sudėtingesnių analogų cheminei sintezei. Pavyzdžiui, citrinų kvapo citralis, pirmiausia jį „supaprastinus“ į intensyvaus melionų kvapo melonalį, gali būti panaudotas terpenoido retrigeraninės rūgšties sintezei.

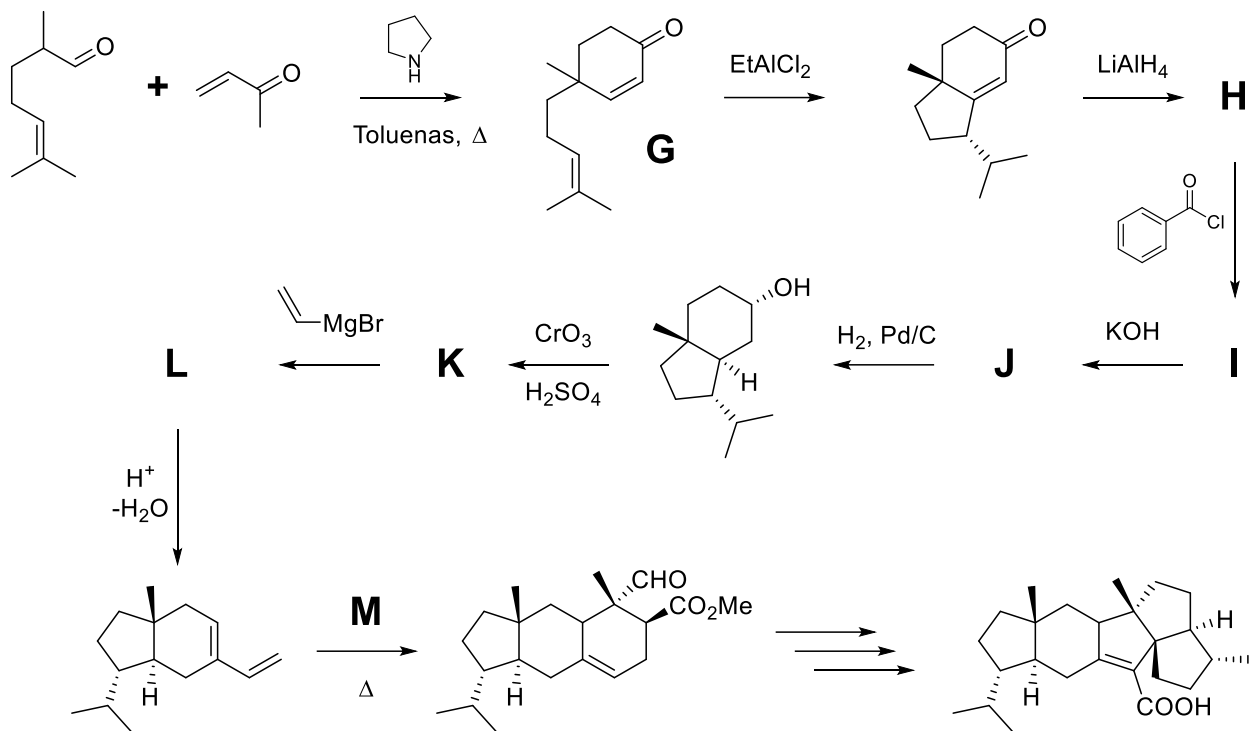


**5.6.** Keli junginio **D** fragmentai sudaro citralio molekulės karkasą?

**5.7.** Pavaizduokite melonalio sintezės tarpinį produktą **E** ir jo tolimesnės reakcijos metu taip pat susidarantį „neįdomų“ produktą – organinę druską **F**. Šios druskos anijonas taip pat būtų gautas dalinai oksidavus anksčiau aptartą junginį **B**.

**5.8.** mCPBA yra oksidatorius, kuris taip pat gali reaguoti su C=C dvigubaisiais ryšiais. Koks ciklinis šalutinis produktas tikėtinausias tokios reakcijos su citraliu metu? Pavaizduokite jį.

Toliau pavaizduota dalinė retrigeraninės rūgšties sintezės schema.



5.9. Pateikite **H**, **I**, ir **J** struktūrines formules, jei žinoma, kad **H** ir **J** yra vienas kito diastereomerai.

5.10. Pavaizduokite **I** → **J** virsmo mechanizmą (pakanka pateikti esminius molekulės fragmentus).

5.11. Pateikite tarpinių junginių **K**, **L** ir reagento **M** skeletines formules, jei yra žinoma, kad reagentas **M** reaguoja [4+2] cikloprisijungimo reakcijos keliu. Atkreipkite dėmesį į reikalingą reagento **M** erdvinę konfigūraciją.

5.12. Pateikite junginio **G** susidarymo mechanizmą.

## 6 užduotis. Ne(mėnulio) fazė

2026 m. vasario 27 d., iki pilnatis liko 3 dienos. Tikėkimės, kad ši mėnulio fazė jums neturės įtakos spręsti užduotį apie... medžiagų fazes!

Fazių diagrama – galingas įrankis, leidžiantis tam tikroje temperatūroje ir slėgyje numatyti medžiagos ar jų mišinio agregatinę būseną. 1 pav. pateikta gryno etilenglikolio  $C_2H_6O_2$  teorinė fazių diagrama. Atsakykite į su ja susijusius klausimus:

6.1. Apytiksliai nurodykite etilenglikolio virimo temperatūrą 1 atm slėgyje.

6.2. Turime vakuuminį siurbį, kuris veikia nuo  $-50\text{ }^\circ\text{C}$  iki  $200\text{ }^\circ\text{C}$  temperatūroje ir gali sumažinti slėgį nuo 1 bar iki 1 mbar. Kurie etilenglikolio virsmai yra galimi termodinaminėje pusiausvyroje naudojant tokį vakuuminį siurbį? (galimi keli teisingi pasirinkimai)

virimas

lydymasis

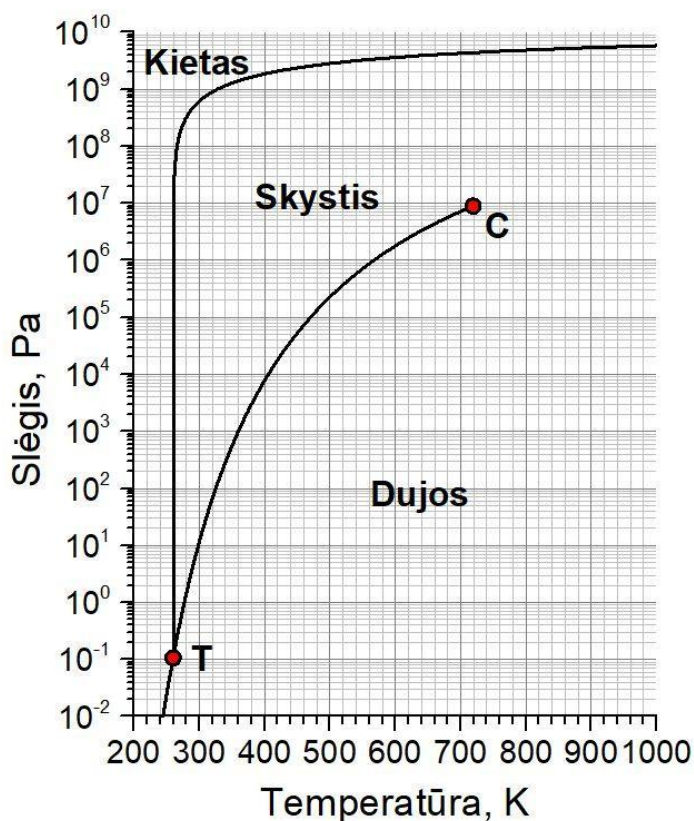
sublimacija

kietėjimas

6.3. Pagal Van der Waals realiųjų dujų teoriją, kritiniame taške, kuriame skysčio ir dujų tankiai suvienodėja ir šios dvi fazės tampa neatskiriamos, galioja tokia lygybė:

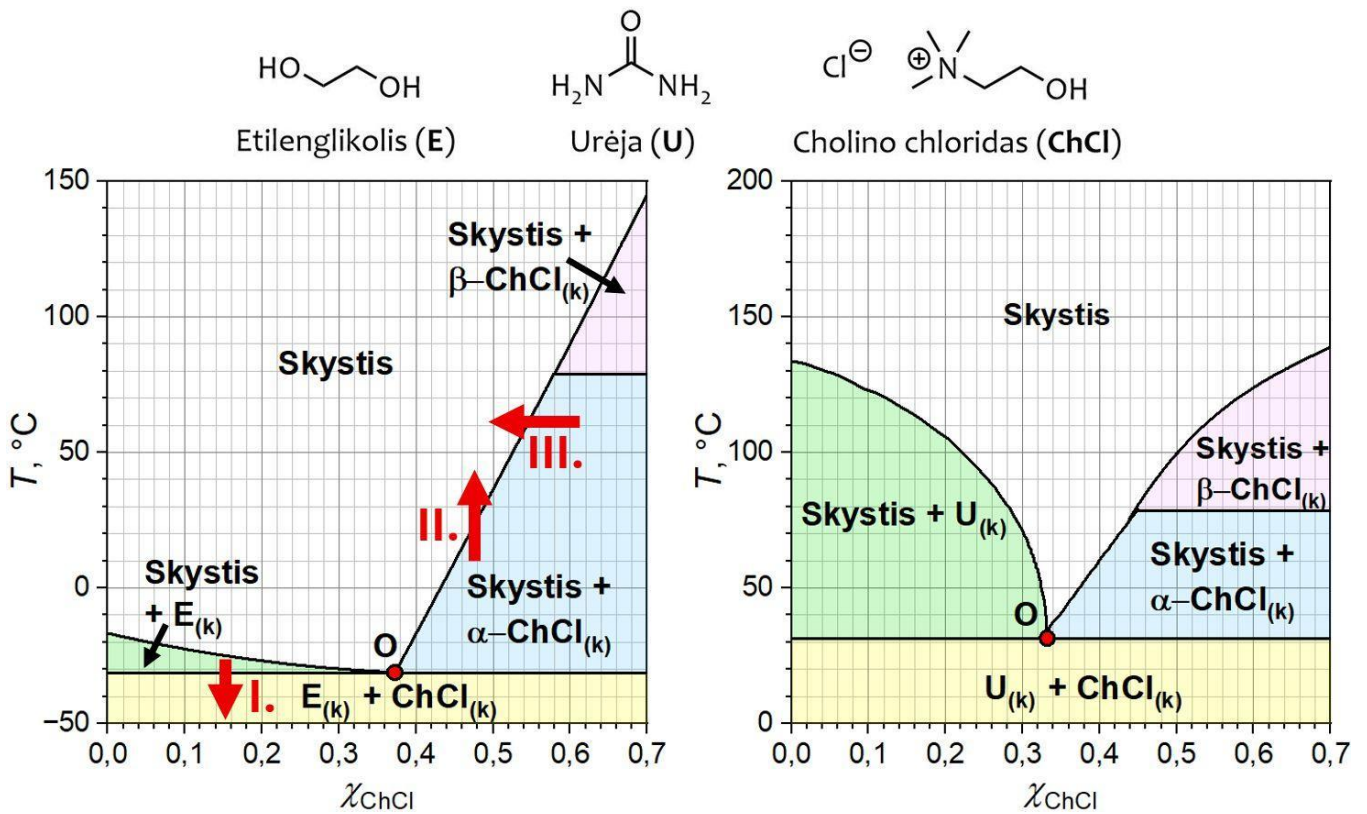
$$\frac{p_c V_{m,c}}{RT_c} = \frac{3}{8}$$

čia  $p_C$ ,  $V_{m,C}$ ,  $T_C$  yra slėgis, molinis tūris ir temperatūra kritiniame taške, o  $R$  – universalioji dujų konstanta. Apskaičiuokite etilenglikolio tankį kritiniame taške.



**1 pav.** Etilenglikolio fazių diagrama. T ir C – specialieji diagramos taškai.

Ir etilenglikolis, ir urėja, maišomi su cholino chloridu, sudaro giliuosius eutektinius tirpiklius (angl. *deep eutectic solvents*, DES). Jie pasižymi tuo, kad dvinario mišinio lydymosi temperatūra smarkiai sumažėja lyginant su grynomis medžiagomis. Tokiems mišiniams apibūdinti reikalingas papildomas parametras: vieno iš komponentų molinė dalis  $\chi_i$  mišinyje. Todėl paprastumo dėlei vietoj trimatės  $(\chi_i, T, p)$  fazių diagramos vaizduojama dvimatė  $(\chi_i, T)$  diagrama pastoviam slėgyje  $p$ . 2 pav. pateiktos medžiagų struktūros ir jų fazių diagramos standartiniame 1 bar slėgyje.



**2 pav.** Medžiagų struktūros ir trumpiniai (viršuje); E:ChCl ir U:ChCl mišinių fazių diagramos (apačioje). O – eutektinis taškas,  $\alpha\text{-ChCl}$  ir  $\beta\text{-ChCl}$  – skirtingos kristalinės cholino chlorido formos.  $\chi_{\text{ChCl}}$  – cholino chlorido molinė dalis mišinyje.

**6.4.** Norima pagaminti lauko sąlygomis neužšalantį tirpiklį. Kuris eutektinis mišinys Lietuvos klimato sąlygoms yra tinkamesnis? Remkitės 2 pav.

E:ChCl

U:ChCl

**6.5.** 2 pav. E:ChCl fazių diagramoje pavaizduoti trys virsmai I–III, kurie vyksta storos rodyklės kryptimi. Nurodykite, kurių virsmų metu molinė mišinio entropija didėja. (galimi keli teisingi pasirinkimai)

I.

II.

III.

**6.6.** Sumaišius 1,00 kg cholino chlorido ir 2,00 kg urėjos aukštoje temperatūroje, gautas skystis yra vėsinaamas. Naudodamiesi 2 pav. apskaičiuokite, kiek kg mišinio vis dar yra skystame būvyje, kai temperatūrą nuleidžiame iki  $80^\circ\text{C}$ .

Fazių diagramos yra ne tik medžiagų fizikinių savybių santrauka, bet ir įrankis paaiškinti kai kuriuos molekuliniam lygmenyje vykstančius procesus. Žinoma, jog į gryną skystį įdedant tirpinio, gaunamo tirpalo lydymosi temperatūra sumažėja per  $\Delta T_{\text{lyd}}$ . Laikant, kad tirpalas idealus (tirpsmo metu tarp molekulinė jėgų stiprumas nekinta), galime šį pokytį įvertinti kiekybiškai:

$$\Delta T_{\text{lyd}} = \frac{iRT_{\text{lyd}}^2}{\Delta H_{\text{lyd}}} \cdot \frac{n_{\text{tirpinio}}}{n_{\text{tirpiklio}}}$$

čia  $i$  – van't Hoff faktorius, nurodantis, į kiek molekulių dalelių vidutiniškai skyla 1 mol tirpinio tirpimo metu,  $T_{\text{lyd}}$  – gryno tirpiklio lydymosi temperatūra,  $\Delta H_{\text{lyd}}$  – tirpiklio lydymosi entalpijos pokytis,  $n_{\text{tirpinio}}$  ir  $n_{\text{tirpiklio}}$  – tirpinio ir tirpiklio kiekiai gautame tirpale.

6.7. Apskaičiuokite  $i$  vertes 4 % ir 30 % molinių dalių  $\text{ChCl}$  mišiniuose urėjoje, jei urėjos  $\Delta H_{\text{lyd}} = 14,3 \text{ kJ/mol}$ .

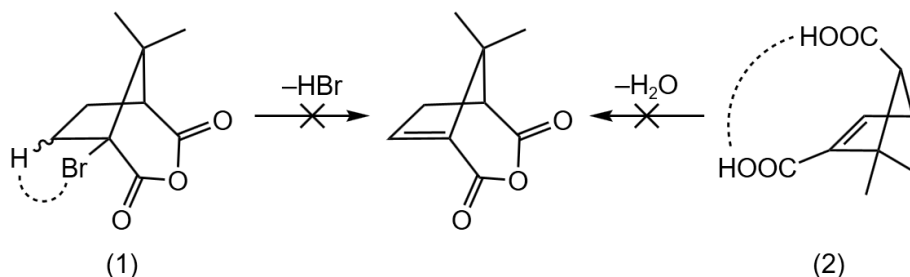
6.8. Remdamiesi gautomis  $i$  vertėmis ir / arba savo žiniomis atsakykite, ar  $\text{ChCl}$  tirpalai urėjoje yra idealūs? Savo atsakymą pagrįskite.

Įtaką lydymosi temperatūros žemėjimui  $\text{ChCl}:\text{U}$  mišinyje daro ir tarpmolekulinės sąveikos tarp urėjos ir chlorido bei tarp cholino ir chlorido. Aplink  $\text{Cl}^-$  susidaro kompleksas, kurio sudėtis atitinka eutektinio taško molinį santykį. Stipriausiai veikianti tarpmolekulinė jėga yra joninis ryšys, silpniau – vandenilinis ryšys, silpniausiai – Van der Valso sąveikos.

6.9. Pavaizduokite susidarantį kompleksą aplink chloridą. Molekules orientuokite taip, kad veiktų kuo įmanoma stipresnė sąveika. Jei susidaro vandeniliniai ryšiai, juos pažymėkite.

## 7 užduotis. Keisti olefinai

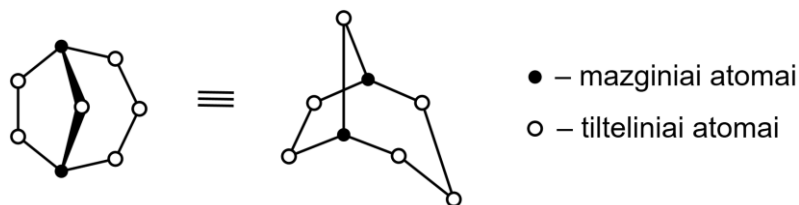
XX a. pradžioje sumanus vokiečių chemikas Julius Brecht'as aktyviai tyrinėjo terpenų kamfeno ir pineno struktūras. Jo eksperimentų metu paaiškėjo, kad  $\alpha$ -bromokamparo rūgšties anhidridas (1) yra atsparus  $\text{HBr}$  eliminacijai, o dikarboksirūgšties (2) dehidratacija susidarant cikliniam anhidridui nevyksta.



1 pav. Brecht'o eksperimentai.

Remdamasis šiais stebėjimais Brecht'as pasiūlė hipotezę, kuri vėliau pavirto taisykle. Ji teigia, kad dvigubasis ryšys biciklinėse sistemose negali susidaryti prie mazginio atomo. Junginiai, nepaisantys šios taisyklės, vadinami anti-Brecht'o olefinais (ABO).

Tam, kad galėtume toliau sėkmingai nagrinėti panašios struktūros junginius, įveskime kelis žymėjimus. Biciklinę sistemą žymėsime  $[x.y.z]$  (kur  $x \geq y \geq z$ ,  $x, y > 0$  ir  $z \geq 0$ ), o  $S$  reikšmė vadinsime sumą tiltelinių atomų, sudarančių biciklinio junginio skeletą. Pavyzdžiui, biciklo[3.2.1]oktano  $S = 3 + 2 + 1 = 6$ . ABO, kurių  $S \geq 7$ , gali būti izoliuoti, o turintys mažesnę  $S$  reikšmę – ne, tačiau juos galima stebėti, pvz. BMR spektre.

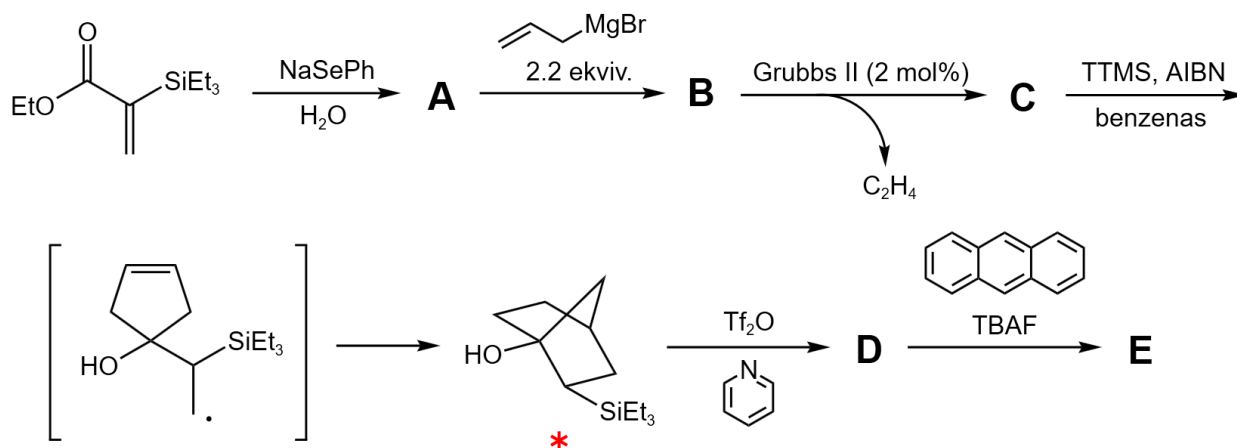
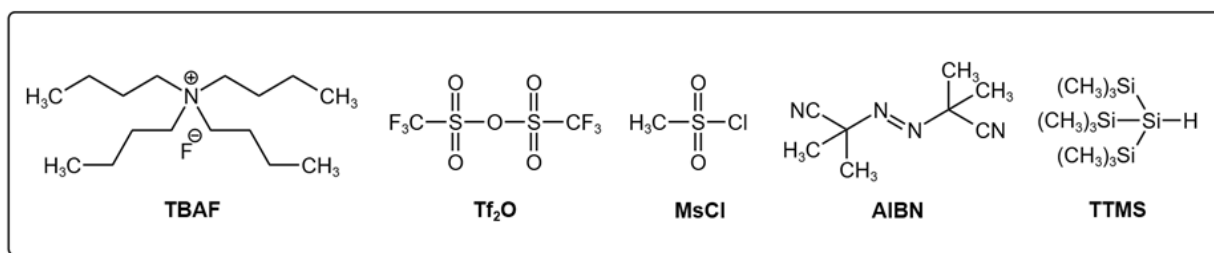


2 pav. Biciklo[3.2.1]oktanas.

7.1. Kiek iš viso yra biciklinių alkanų, kurių  $S \leq 6$  ir  $z \neq 0$ ? Nupieškite jų struktūras.

Visai neseniai, 2024 m., Kalifornijos universiteto chemikų grupė sugalvojo, kaip susintetinti biciklinius alkenus, kurių  $S \leq 7$ . Nors išskirti šių ABO nepavyko, jų egzistavimas buvo sėkmingai patvirtintas naudojant chemines gaudykles (junginius, kurie greitai sureaguoja su nestabiliomis molekulėmis ir sudaro

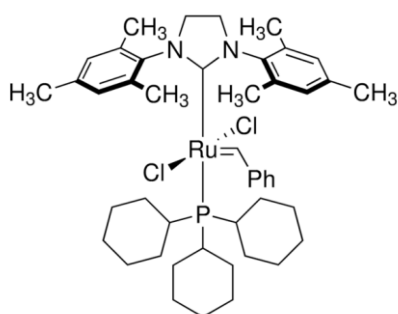
stabilius produktus), pavyzdžiui antracena. Žemiau jums pateikta sintezės, kurioje kaip tarpinė dalelė susidaro biciklo[2.2.1]hept-1-enas ( $S = 5$ ), schema.



7.2. Nubraižykite junginių A–E struktūrinės formules. Jums gali praversti šios užuominos:

- Grubbs II katalizuoja terminalinių alkenų tarpusavio reakciją.
- $ASE(C_6H_6) = 36 \text{ kcal/mol}$ ,  $ASE(C_{10}H_8) = 61 \text{ kcal/mol}$ . Čia ASE – aromatinės stabilizacijos energija.

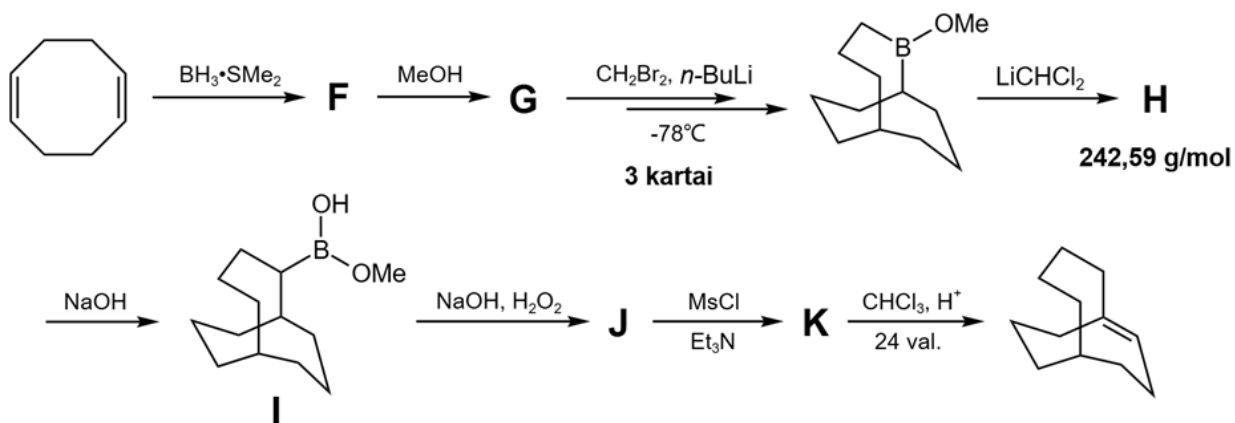
7.3. Reikia pripažinti, kad Grubbs II katalizatorius atrodo baisiai... Kiek valentinių elektronų turi Ru šiame organometaliniame komplekse?  $C_{21}H_{26}N_2$  ligandas yra *karbenas*.



3 pav. Grubbs II katalizatorius.

7.4. Kiek chiralinių centrų yra junginyje, pažymėtame žvaigždute (\*)? Kiek jis turi stereozomerų?

Įdomiausia tai, jog kai kurie  $S \geq 7$  ABO yra ne tik pakankamai stabilūs, kad būtų išskirti, bet dar ir tinginiai – sugeba pasipriešinti hidrinimui Pd/C sąlygomis. Vieną tokį keistuolį biciklinį alkeną biciklo[4.3.3]dodec-1-eną ( $S = 10$ ) galima pagaminti labai patogiai, didelę dalį reakcijų atliekant tame pačiame inde. Šios sintezės kulminacija – biciklinio junginio anglies karkaso ilginimas ( $-CH_2-$ ) fragmentais iki gaunamas reikiamo dydžio tiltelis.



7.5. Nubraižykite junginių **F–H**, **J** ir **K** struktūrines formules. Jums gali praversti šios užuominos:

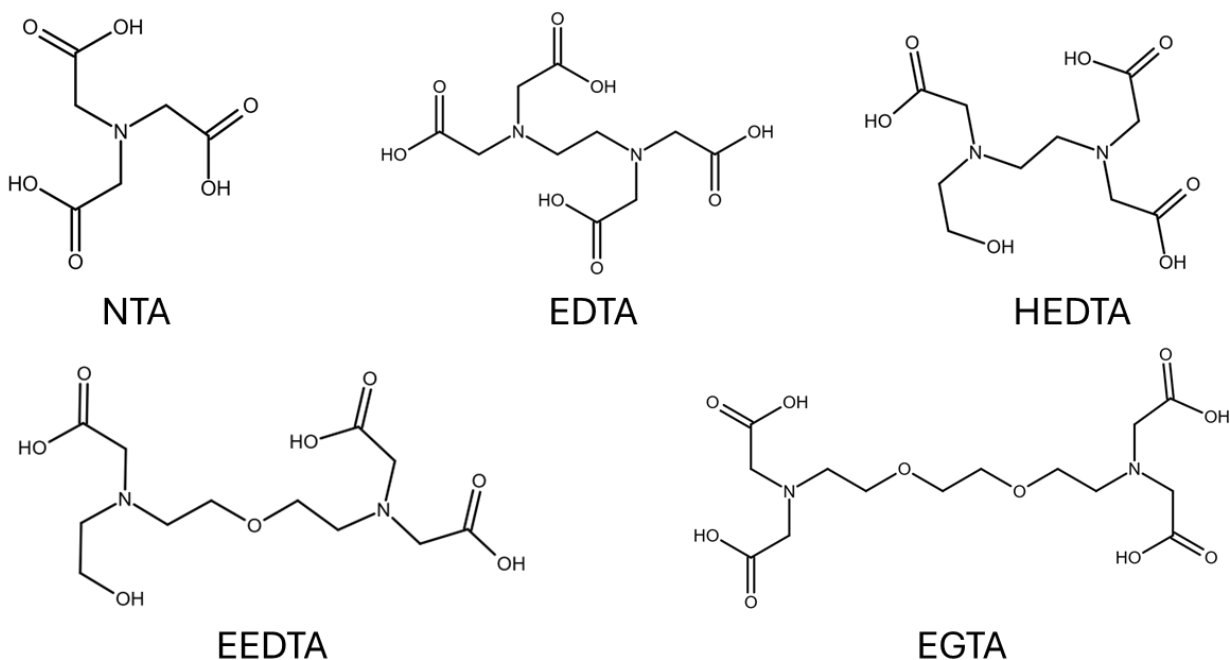
- **F** dar žinomas **9-BBN** pavadinimu.
- **J**  $^{11}\text{B}$  BMR spektre smailės nestebimos.
- **K** paveikus  $\text{OsO}_4$  gaunamas junginys, nuo **J** besiskiriantis viena (-OH) grupe.

7.6. Paaiškinkite, kodėl kondensuotoje būsenoje **F** junginys sudaro stabilų dimerą, o **G** – ne.

7.7. Pavaizduokite reakcijos **I** → **J** mechanizmą.

## 8 užduotis. Aminopolikarboksirūgštys

Aminopolikarboksirūgštys – tai tretiniai aminai, turintys karboksilo funkcinių grupių. Šie organiniai junginiai sudaro labai patvarius 1:1 kompleksus su didžiąją dalimi metalų jonų. Dėl šios savybės yra plačiai taikomi analitinėje chemijoje kompleksometriniams titravimams, vandens minkštinimui, metalų jonų surišimui pramoniniuose procesuose, taip pat medicinoje ir aplinkosaugoje. Žemiau yra pavaizduota dalis šių rūgščių ir jų rūgštingumo pusiausvyros konstantos vertės.



1 pav. Aminopolikarboksirūgštys.

**1 lentelė.** Aminopolikarboksirūgščių jonizacijos konstantos

	pK <sub>a1</sub>	pK <sub>a2</sub>	pK <sub>a3</sub>	pK <sub>a4</sub>	pK <sub>a5</sub>	pK <sub>a6</sub>
NTA	<1,90	1,90	2,49	9,73	-	-
EDTA	<2,00	<2,00	2,00	2,76	6,16	10,26
HEDTA	<2,64	<2,64	2,64	5,33	9,73	-
EEDTA	<1,90	<1,90	2,67	8,82	9,49	-
EGTA	<2,00	<2,00	2,00	2,68	8,85	9,43

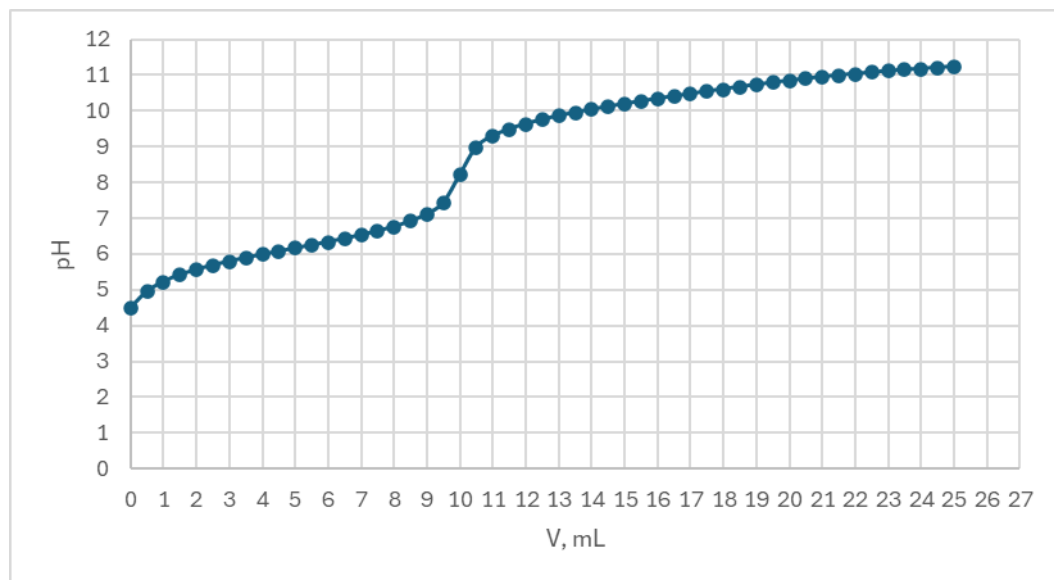
**8.1.** Pavaizduokite Zn<sup>2+</sup> jono ir NTA kompleksą. Zn<sup>2+</sup> jono koordinacinis skaičius komplekse lygus 4.

**8.2.** Į pateiktą lentelę įrašykite, kiek koordinacinių ryšių su metalo jonu sudaro kiekviena iš molekulių stabiliausiame komplekse.

EDTA	HEDTA	EEDTA	EGTA

**8.3.** Pavaizduokite vandeniniame tirpale dominuojančias EDTA, HEDTA ir EGTA formas, kai pH = 7.

Vienos iš šių aminopolikarboksirūgščių dinatrio druskos 10,00 mL tūrio tirpalas buvo titruojamas su 0,0100 M NaOH tirpalu, titravimo metu buvo fiksuojamas tirpalo pH. Žemiau pateikta titravimo kreivė.



**2 pav.** Nežinomos rūgšties titravimo 0,0100 M NaOH tirpalu kreivė.

**8.4.** Kuriuo iš šių indikatorių galima tiksliausiai nustatyti ekvivalentinį tašką? Atsakymą pagrįskite.

- Bromkrezolio purpurinis (pK<sub>a</sub> = 6,4)
- Krezolio raudonasis (pK<sub>a</sub> = 8,5)
- Alizarino geltonasis (pK<sub>a</sub> = 11,2)

**8.5.** Kurios aminopolikarboksirūgšties dinatrio druską atitinka ši titravimo kreivė? Atsakymą pagrįskite.

**8.6.** Kokia yra pradinė druskos koncentracija?

**8.7.** Apskaičiuokite apytikslią vandeninio 0,100 M  $\text{Na}_2\text{H}_2\text{EDTA}$  druskos tirpalo pH.

Medicinoje EDTA yra naudojama apsinuodijimo sunkiaisiais metalais gydymui. Ji kraujo serume suriša sunkiuosius metalus į kompleksinius junginius, kuriuos inkstai pašalina iš organizmo. Kad dėl gydymo iš organizmo nebūtų pašalinami  $\text{Ca}^{2+}$  jonai, vietoje dažnai sutinkamos  $\text{Na}_2\text{H}_2\text{EDTA}$  druskos yra naudojama  $\text{CaH}_2\text{EDTA}$  druska.

**8.8.** Tarkime, kad apsinuodijusio žmogaus kraujo serume švino koncentracija siekia  $2,0 \mu\text{M}$ . Gydymo metu suleidžiama  $\text{CaH}_2\text{EDTA}$  tirpalo tiek, kad pradinė koncentracija kraujo serume siektų  $1,7 \mu\text{M}$ . Kokia dalis švino jonų yra surišama į kompleksą, jei pradinė nesurištų į kompleksą  $\text{Ca}^{2+}$  jonų po  $\text{CaH}_2\text{EDTA}$  suleidimo koncentracija lygi  $1,0 \text{ mM}$ ? Kalcio ir švino kompleksų su EDTA stabilumo konstantų logaritminės vertės yra atitinkamai lygios 10,7 ir 17,9.

**8.9.** Apskaičiuokite, kokia švino jonų dalis būtų surišta į kompleksą, jei švino komplekso su EDTA stabilumo konstantos logaritminė vertė sumažėtų iki 13,7.