

Valikvõistlus, teoreetiline voor

11. aprill 2012 a., Tartu

Ülesanne 1.

$$a) m(\text{Pt}) = 4 \cdot 195,08 \text{ g mol}^{-1} / (6,02 \cdot 10^{23}) = 1,296 \cdot 10^{-21} \text{ g}$$

$$V(\text{ühikrakk}) = m(\text{Pt}) / (21.472 \text{ g cm}^{-3} \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}/\text{m}^{-3}) = 6,03 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

$$a = 3\sqrt{V} = 3,922 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 3,922 \text{ \AA}$$

$$\text{Pt raadius on } r = \sqrt{(2(a/2)^2)} / 2 = 1,39 \text{ \AA}$$

b) i) Tahktsentreeritud on tihedaim pakend.

Ruumiline täituvus on:

$$\text{lihtne kuubiline: } a = 2r, \text{ täituvus} = 4/3\pi \cdot r^3/a^3 = 52,4 \%$$

$$\text{kesktsentreeritud kuubiline } \sqrt{3}a = 4r, \text{ täituvus} = 2 \cdot 4/3\pi \cdot r^3/a^3 = 68 \%$$

$$\text{tahktsentreeritud kuubiline } \sqrt{2}a = 4r, \text{ täituvus} = 4 \cdot 4/3\pi \cdot r^3/a^3 = 74 \%$$

$$\text{ii) tihedus: } 21,472 \text{ g cm}^{-3}$$

$$\text{iii) tihedus: } 21,472 \cdot 52,4 / 74 = 15,2 \text{ g cm}^{-3}$$

$$\text{iv) tihedus: } 21,472 \cdot 68 / 74 = 19,2 \text{ g cm}^{-3}$$

$$\text{c) 002 tahk: } 2\Theta = \arcsin(1 \cdot 1,54956/2/(3,924/2)) \cdot 2 = 46,2^\circ$$

$$\text{111 tahk: } 2\Theta = \arcsin(1 \cdot 1,54956/2/(3,924/\sqrt{3})) \cdot 2 = 39,8^\circ$$

d) Mõlemad on suurima võimaliku pakkestruktuuriga, heksagonaalse korral ülejäärgmised kihid kattuvad, kuubilise korral mitte.

Ülesanne 3.

1) $[\text{Fe}(\text{CO})_5]$ trigonaalne bipüramiid

$[\text{Mn}_2(\text{CO})_{10}]$ ja $[(\text{RuCl}_2(\text{CO})_3)_2]$ heksagonaalsed, M-M üksikside, sildligande pole

$[(\text{RuCl}_2(\text{CO})_3)_2]$ on isomerid, kus Cl asuvad cis ja trans

2) $[(\text{RuCl}_2(\text{CO})_3)_2]$

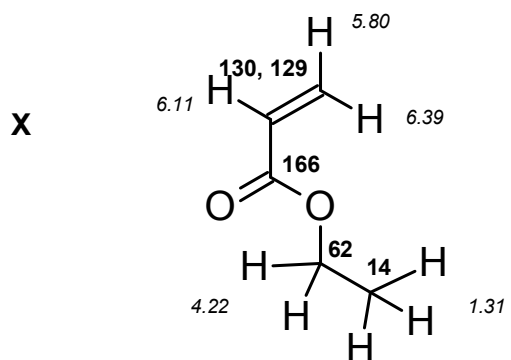
3) Elektronide arv: $[(\text{RuCl}_2(\text{CO})_3)_2]$ on 17, M-M sidemega saab 18

i) ei. M ümber pole vabu koordinatsioonikohti

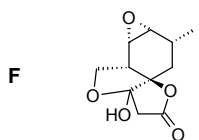
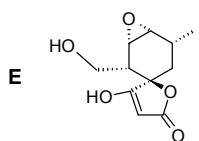
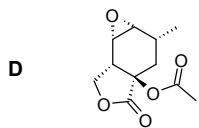
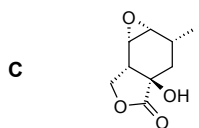
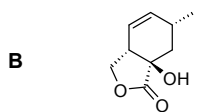
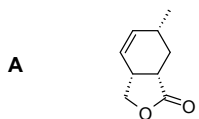
ii) prep problems

iii) energia kuulub sideme lõhkumiseks – esimene etapp on kiirust limiteeriv

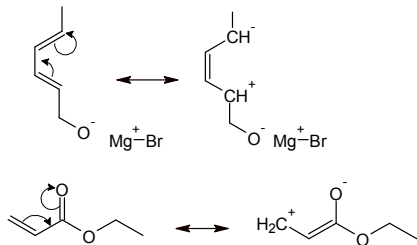
Ülesanne 4.



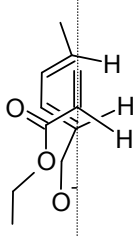
a) X-



b) Regioselektiivsuse koha pealt reageerib nukleofiilsem dieenofili süsinik elektrofiilseima dieeni süsinikuga.



Aktiveeritud vaheolekus, *endo*-produkti tekkimisel, asuvad reaktsiooniskeemil ühel pool keskmist joont olevad rühmad ka ruumis ühel pool. Karbonüül rühma elektronid stabiliseerivad vaheolekut, mistõttu asuvad dieeniga kohakuti.



Ülesanne 5.

a) $T = (3cR/\beta)^{1/3} = 1,8 \cdot 10^8 \text{ K}$

$p_A = cRT = 3,1 \cdot 10^{17} \text{ Pa} = 3,1 \cdot 10^{12} \text{ bar}$

Päikese tuumas temperatuur $T \approx 1,3 \cdot 10^7 \text{ K}$ ja plasma rõhk $p \approx 10^{16} \text{ Pa}$.

b) $p_f = \beta T^4 / \beta = 0,33 \text{ Pa}$

$p_B = cRT = 1,0 \cdot 10^{13} \text{ Pa}$

$p_B \gg p_f$

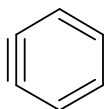
c) $E_b = az_1z_2/r_{12} = 0,43 \text{ MeV}$

d) $E = b\Delta m = -17,6 \text{ MeV}$ (energia eraldub)

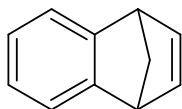
e) i) **A**-s toimub, ii) **B**-s ei toimu

Ülesanne 6.

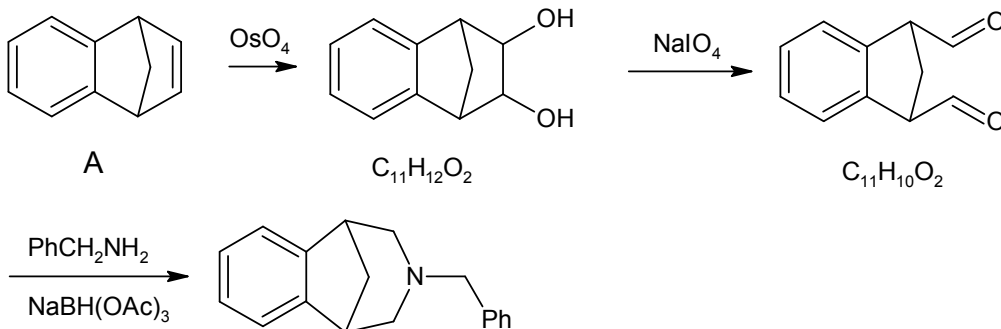
1. Bensüün:



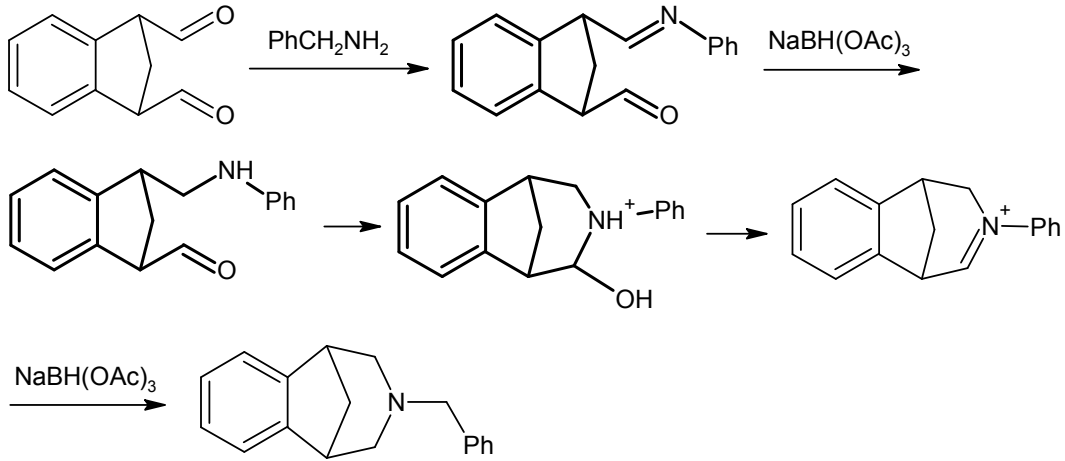
2. Ühend A:



3. Ühendite B, C ja D struktuurvalemid.



4. Ühendi D sünteesi vaheühendid.



5. Ühendite E, F, G ja H struktuurvalemid:

