

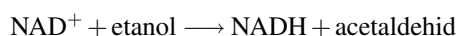
SZÁMOLÁSI FELADATOK

1. Egy fehérje kicsapásához tartozó standard reakcióentalpia 512 kJ/mol és standard reakcióentrópia 1,60 kJ/K/mol. Határozza meg, hogy milyen hőmérséklettartományban játszódik le önként a reakció!
2. Mekkora egy klíma teljesítménytényező maximális értéke, ha a szobában 20 °C-ot akarunk elérni és kint 35 °C van?
3. Egy kutató egy fotót mutat, melyen egyszerre négy fázis létezik egy egykomponensű rendszerben. A kutató azt állítja, hogy az egyes fázisok a következők: I típusú jég, II típusú jég, víz illetve vízgőz. Lehetséges ez a Gibbs-féle fázisszabály szerint?
4. Egy gáz fugacitási együtthatója 0,72 T=200 K-en és 50 atm nyomáson. Az ideális gázhoz képest mekkora a szabadentalpia változása 5 mol reális gáz esetén?
5. Az etanol forráspontja 78,3 °C 101325 Pa nyomáson és a párolgási entalpia 39,3 kJ/mol. Mekkora a gőznyomása 30 °C-on?
6. A Mt. Blanc 4807 m magas. Hány fokon forr a víz, ha a párolgási entalpia 40,79 kJ/mol és abban a magasságban a légnyomás 55,5 kPa? A víz forráspontja 100 °C 101325 Pa nyomáson.
7. A Kékestető 1015 m magas. Hány fokon forr a víz, ha a párolgási entalpia 40,79 kJ/mol és abban a magasságban a légnyomás 90,0 kPa? A víz forráspontja 100 °C 101325 Pa nyomáson.
8. A diklórmétán gőznyomása 24,1 °C-on 400 torr és a párolgási entalpiája 28,7 kJ/mol. Mekkora azon gőz hőmérséklete, amelynek gőznyomása 500 torr? (760 torr = 101325 Pa)
9. Egy 5 dm³ térfogatú edényben összekeverünk 2 mol O₂ gázt, 4 mol N₂ gázt, és 0,5 mol Ar gázt 1 atm nyomáson és 293 K hőmérsékleten. Mekkora az elegyedéskor bekövetkező entrópiaváltozás, entalpiaváltozás, illetve szabadentalpiaváltozás, ha a gázok ideális gázként viselkednek? R=8,314 J/(mol K)
10. A tiszta etanol gőznyomása 20 °C-on 48 torr, míg a tiszta dietil-éteré 450 torr. A dietil-éter gőznyomása az etanol 0,6 moltörtjénél 260 torr. Ideális elegyet képez a két anyag? Ha nem, akkor milyen elegyet képez? (760 torr = 101325 Pa)
11. A benzol és a toluol ideális elegyet képez. Mekkora az oldat gőznyomása $x_{\text{toluol}} = 0,35$ oldatban, ha a tiszta toluol gőznyomása 32,06 torr és a tiszta benzolé 103,01 torr? (760 torr = 101325 Pa)
12. Tiszta aceton gőznyomása 344,5 torr míg a tiszta kloroformé 293 torr 35,2 °C-on. Egy 0,7090 mol acetont és 0,2910 mol kloroformot tartalmazó elegy gőznyomása 286 torr, melyben az aceton moltörtje 0,8062. A Henry-állandó ezen a hőmérsékleten a kloroformra acetonban 145 torr. Mekkora az aktivitás és a moltört egységeiben definiált aktivitási együttható az acetonra illetve a kloroformra? (760 torr = 101325 Pa)
13. Mekkora anyagmennyiségű nitrogéngáz oldódik fel 5,00 l vérben 200 m mélységben, ahol a nitrogén parciális nyomása 16 atm (A Henry-állandó értéke 1430 atm mol⁻¹ l)? Mekkora ezen anyagmennyiségű nitrogéngáz térfogata 1,00 atm nyomáson és 20 °C-on? (1 atm = 101325 Pa)
14. A bróm híg oldata CCl₄-ben ideálisan híg oldatot képez. Mekkora az oldat összetétele, ha a bróm gőznyomása 8 torr? Mekkora a CCl₄ gőznyomása ezen oldatban? A brómra vonatkozó Henry-állandó 122,36 torr, míg a tiszta CCl₄ gőznyomása 33,85 torr. (760 torr = 101325 Pa)
15. Számolja ki a szén-diszulfid aktivitásának és a moltörtre vonatkoztatott aktivitási együtthatójának értékét $x_{\text{CS}_2} = 0,9554$ összetételű szén-diszulfid/dimetoximetán (DMO) oldatra a mellékelt táblázat alapján, mely a gőztenziókat adja meg az összetétel függvényében!

x_{CS_2}	$p_{\text{CS}_2}/\text{kPa}$	$p_{\text{DMO}}/\text{kPa}$
0,9108	64,22	16,56
0,9554	66,78	8,68
1,000	68,58	0,00

16. Mekkora az ionerősség egy 0,14 mol/dm³ koncentrációjú NaCl-ot és 0,21 mol/dm³ koncentrációjú Na₃PO₄-ot tartalmazó oldatban?
17. Számítsa ki egy 0,0017 mol/dm³ koncentrációjú Ca(NO₃)₂-oldat közepes aktivitási együtthatóját a Debye-Hückel-határtörvény alkalmazásával!
18. A sejten belüli glükózkoncentráció 0,12 mM, míg a sejten kívüli 12,3 mM. Mekkora a szabadentalpia-változás 3 mol glükóz molekula sejtbe jutásakor 37 °C-on?

19. A $[K^+]_b=400$ mM az idegsejt intracelluláris folyadékában, míg az extracellulárisban $[K^+]_k=20$ mM. Mekkora a szabadentalpia-változás 3 mol ion kijuttatásakor 37°C-on, ha $E_{\text{cell}} = -70$ mV a kinti sejthez viszonyítva?
20. A legmagasabb fák a Kaliforniában élő mammutfenyők, melyek magassága ~ 105 m. Mekkora ozmózisnyomás szükséges a víz eljuttatásához a gyökerektől a fa tetejéig, ha a víz sűrűsége 1 g/cm^3 és $g=9,81 \text{ m/s}^2$?
21. Egy 0,80 g fehérjét tartalmazó oldat 100 cm^3 -nek ozmózisnyomása 275 Pa 25 °C-on. Mekkora a fehérje moláris tömege?
22. A fagyáspontja 750 g CCl_4 -nak 10,5 K-nel csökkent 100 g ismeretlen hozzáadásakor. Mekkora az ismeretlen moláris tömege? ($K_{M,\text{fagy}} = 30 \text{ K mol}^{-1}\text{kg}$)
23. Egy apoláris klórbenzol koncentrációja egy hal zsírsavjában $1,5 \cdot 10^7$ ppm, míg a vízében 15 ppm. Mekkora a klórbenzol megoszlási hányadosa a vízhez viszonyítva?
24. Egy antibiotikum 54,7 mg-ját oldották fel 30,0 ml vízben. Ebből az oldatból 15 ml éterrel extrahálták ki az antibiotikumot. Az éteres fázisban az éter elpárologtatása után 37,5 mg antibiotikumot találtak, a többi a vizes fázisban maradt. Mekkora az antibiotikum megoszlási hányadosa a vízhez viszonyítva?
25. Egy mol ismeretlent fel tudunk oldani 47 ml vízben, 8,1 ml kloroformban illetve 370 ml dietil-éterben vagy 86 ml benzolban. Melyik oldószert használná az ismeretlen vizes oldatból való eltávolítására? (Segítség: számítsa ki a megoszlási hányadosokat az egyes oldószere a vízhez viszonyítva)
26. Mekkora az $\text{N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{NH}_3(\text{g})$ reakció egyensúlyi állandója $T=300$ K-en, ha a standard reakcióentalpia $-46,11 \text{ kJ/mol}$ és a standard reakcióentrópia $-99,38 \text{ J/mol/K}$?
27. Az alkohol dehidrogenáz az alábbi egyenlet szerint vonja el az alkoholt a vérből 37 °C-on:



Mekkora a folyamat egyensúlyi állandója? Az egyes standard képződési szabadentalpiák: $G_k^0(\text{NAD}^+) = 1059,1 \text{ kJ/mol}$, $G_k^0(\text{NADH}) = 1120,1 \text{ kJ/mol}$, $G_k^0(\text{etanol}) = 63,0 \text{ kJ/mol}$, és $G_k^0(\text{acetaldehid}) = 24,1 \text{ kJ/mol}$.

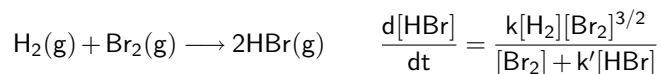
Megoldások:

- | | |
|---|--|
| 1. $T > 320 \text{ K} = 47 \text{ °C}$ | 14. $x_{\text{Br}_2}=0,0654$, $x_{\text{CCl}_4}=0,9346$, $p_{\text{CCl}_4}=31,64 \text{ torr}$ |
| 2. $c_m=19,5$ | 15. $a_{\text{CS}_2}=0,9738$ és $\gamma_{\text{CS}_2}=1,019$ |
| 3. $K=1$ -re nem lehet $F=4$ | 16. $I=1,40 \text{ mol/dm}^3$ |
| 4. $\Delta G = -2,73 \text{ kJ}$ | 17. $\gamma_{\pm}=0,845$ |
| 5. $p=11,9 \text{ kPa}$ | 18. $\Delta G=-35,8 \text{ kJ}$ |
| 6. $T = 83,7 \text{ °C}$ | 19. $\Delta G=-2,9 \text{ kJ}$ |
| 7. $T = 96,7 \text{ °C}$ | 20. $\pi=1,03 \text{ MPa}$ |
| 8. $T = 29,9 \text{ °C}$ | 21. $M=72,1 \text{ kg/mol}$ |
| 9. $\Delta H_{\text{mix}}=0$, $\Delta S_{\text{mix}}=46,40 \text{ J/K}$,
$\Delta G_{\text{mix}} = -13,60 \text{ kJ}$ | 22. $M=381 \text{ g/mol}$ |
| 10. Ideális elegynél $p_{\text{dietil éter}} = 270 \text{ torr}$; reális elegy, pozitív eltéréssel | 23. $K_{o/v} = 10^6$ |
| 11. $p = 78,18 \text{ torr}$ | 24. $K_{\text{antibiotikum}/v} = 4,36$ |
| 12. acetonnra: $a=0,6693$ és $\gamma=0,9440$ illetve kloroformra:
$a=0,382$ és $\gamma=1,314$ | 25. kloroform, mert $K_{o/v}=5,80$ a legnagyobb |
| 13. $n=0,0559 \text{ mol}$ és $1,34 \text{ l}$ a térfogat | 26. $K=688$ |
| | 27. $K=1,89 \cdot 10^{-4}$ |

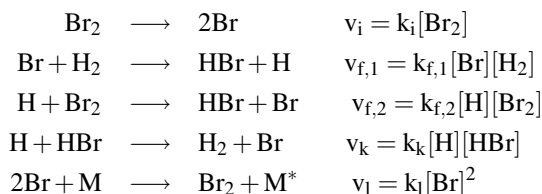
KINETIKAI FELADATOK

A feladatokban a cél a mért sebességi egyenlet kialakítása a mechanizmus alapján.

1. A HBr(g) képződése az alábbi bruttó reakcióegyenlettel és mért sebességi egyenlettel adható meg

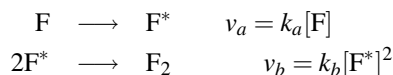


A reakció az alábbi mechanizmussal írható le



- Azonosítsa a láncindító, a láncfolyató és a lánclezáró lépéseket!
- Írja fel a termék koncentrációjának időbeli változását leíró differenciálegyenletet!
- Írja fel a H koncentrációjának időbeli változását megadó differenciálegyenletet!
- Írja fel a Br koncentrációjának időbeli változását megadó differenciálegyenletet!
- A kvázistacionaritás elvének alkalmazásával fejezze ki a Br közttermék koncentrációját!
- A kvázistacionaritás elvének alkalmazásával fejezze ki a H közttermék koncentrációját!
- A köztitermékekre kapott kifejezések behelyettesítésével adja meg a termék képződésének időbeli változását leíró differenciálegyenletet! (Segítség: ne felejtse el, hogy a köztitermékekre érvényes a kvázistacionaritás elve)
- A mért sebességi egyenletben szereplő k és k' mitől és hogyan függ?

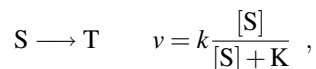
2. Egy fehérje adott hőmérsékleten történő dimerizációjára az alábbi mechanizmus írható fel:



ahol F a fehérje, F^* a denaturálódott fehérje, és F_2 a dimer fehérje.

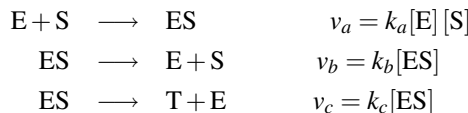
- Írja fel a dimer fehérje koncentrációjának időbeli változását leíró egyenletet!
- Adja meg azt a részecskét, amely a mechanizmus alapján köztterméknek tekinthető!
- Írja fel a közttermék koncentrációjának időbeli változását megadó egyenletet!
- A kvázistacionaritás elvének alkalmazásával fejezze ki a közttermék koncentrációját!
- Adja meg a sebességi egyenletet, azaz a kapott kifejezés behelyettesítésével adja meg a dimer fehérje koncentrációjának időbeli változását leíró egyenletet! (Az egyenlet csak a reaktáns vagy a termék koncentrációját tartalmazza az egyes sebességi együtthatók mellett!)
- Kísérletileg az alábbi sebességi egyenletet mérték: $\frac{d[\text{F}_2]}{dt} = k_{\text{mért}}[\text{F}]$.
A mechanizmus alapján kapott sebességi egyenletet a kísérletileg kapott sebességi egyenlettel összehasonlítva mit tud megállapítani a mechanizmusról? A mechanizmus sebességi együtthatóival fejezze ki $k_{\text{mért}}$ mért sebességi együtthatót!

3. Az enzimkatalizált reakciók mért sebességi egyenlete a következő:



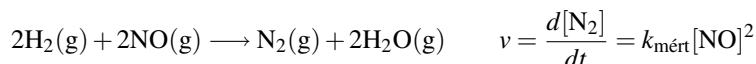
ahol S a reaktáns (szubsztrátot), míg T a terméket jelöli.

A javasolt mechanizmus az alábbi egyenletekkel írható fel, ahol E az enzimet jelenti:

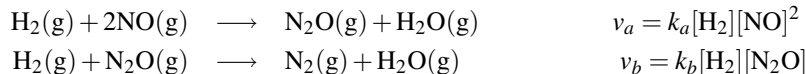


- Írja fel a termék (T) koncentrációjának időbeli változását leíró differenciálegyenletet!
- Adja meg azt a részecskét, amely a mechanizmus alapján köztiterméknek tekinthető!
- Írja fel a köztitermék koncentrációjának időbeli változását megadó differenciálegyenletet!
- A kvázistacionaritás elvének alkalmazásával fejezze ki a köztitermék koncentrációját, ha tudja, hogy az enzim mennyiségére felírható az alábbi mérlegegyenlet: $[E]_0 = [E] + [ES]$, ahol $[E]_0$ a kezdeti enzimkoncentráció!
- A kapott kifejezést behelyettesítésével adja meg a termék koncentrációjának időbeli változását leíró differenciálegyenletet! (Az egyenlet csak a reaktáns vagy a termék koncentrációját illetve az enzim kezdeti koncentrációját tartalmazza az egyes sebességi együtthatók mellett!)
- A kapott egyenletet a mért sebességi egyenlettel hasonlítsa össze, és írja fel, hogy a mért sebességi egyenletben szereplő k és K paraméterek mitől és hogyan függenek?

4. A nitrogén-monoxid hidrogénnel történő reakciójának mért sebességi egyenlete a következő:



A javasolt mechanizmus az alábbi egyenletekkel írható fel:

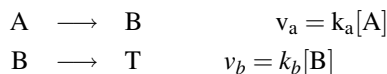


- Írja fel a termék (N_2) koncentrációjának időbeli változását leíró differenciálegyenletet!
- Adja meg azt a részecskét, amely a mechanizmus alapján köztiterméknek tekinthető!
- Mi a kvázistacionárius közelítés? Milyen körülmények között használható a kvázistacionárius közelítés?
- Írja fel a köztitermék koncentrációjának időbeli változását megadó differenciálegyenletet!
- A kvázistacionaritás elvének alkalmazásával fejezze ki a köztitermék koncentrációját!
- A kapott kifejezést behelyettesítésével adja meg a termék (N_2) koncentrációjának időbeli változását leíró differenciálegyenletet! (Az egyenlet csak a reaktáns és/vagy a termék koncentrációját tartalmazza az egyes sebességi együtthatók mellett!)
- A mechanizmus alapján kapott sebességi egyenlet hogyan egyszerűsíthető a mért sebességi egyenletté? A mechanizmus sebességi együtthatóival hogyan fejezhető ki $k_{\text{mért}}$?

5. Egy A anyag bomlása T terméké az alábbi bruttó egyenlettel adható meg



A reakció az alábbi mechanizmussal írható le



- Írja fel a termék koncentrációjának időbeli változását leíró egyenletet!
- Írja fel a reaktáns koncentrációjának időbeli változását leíró differenciálegyenletet!
- Adja meg, hogy a reaktáns koncentrációja hogyan változik az időben! (Segítség: a reaktáns kezdeti koncentrációját jelölje 0 alsó indexszel!)
- Mi a kvázistacionárius közelítés? Milyen feltételek között alkalmazható a kvázistacionárius közelítés a fenti reakciómechanizmusra?
- Adja meg azt a részecskét, amely a mechanizmus alapján köztterméknek tekinthető!
- Írja fel a közttermék koncentrációjának időbeli változását megadó differenciálegyenletet!
- A kvázistacionaritás elvének alkalmazásával fejezze ki a közttermék koncentrációját!
- A kapott kifejezés alapján adja meg, hogy mikor (milyen időtartamban) nem érvényes a kvázistacionárius közelítés, és miért!

A számítási feladatokhoz szükséges képletek

$$\Delta G_r^0 = \Delta H_r^0 - T \Delta S_r^0$$

$$c_{max} = \frac{T_h}{T_m - T_h}$$

$$SZ = K - F + 2$$

$$G_{m_{\text{reális}}} = G_{m_{\text{ideális}}} + RT \ln \gamma$$

$$G = n \cdot G_m$$

$$\ln \frac{p_2}{p_1} = \frac{\Delta H_m}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$\Delta G_{mix} = RT \sum_i n_i \ln x_i = nRT \sum_i x_i \ln x_i, \quad \Delta S_{mix} = -nR \sum_{i=1}^K x_i \ln x_i, \quad \Delta H_{mix} = 0$$

$$p_i = x_i \cdot p_i^*, \quad p_{oldat} = \sum_i p_i$$

$$p_2 = K_2 x_2$$

$$a_i = \gamma_i x_i, \quad a_{2,m} = \gamma_{2,m} (\bar{m}_2 / \bar{m}^0), \quad a_{2,c} = \gamma_{2,c} (c_2 / c^0)$$

$$I = 1/2 \sum_{i=1}^K c_i z_i^2$$

$$\lg \gamma_{\pm} = -0,509 |z_+ z_-| \sqrt{I / (\text{mol dm}^{-3})}$$

$$\Delta G = G_{kint} - G_{bent} = RT \ln \frac{[X]_b}{[X]_k} + z F E_{cell}$$

$$\pi = c_{oldott} RT$$

$$|\Delta T_{fagy}| = \Delta T_{M,fagy} \bar{m}_B$$

$$K_{m,c} = \frac{c_{X,A}}{c_{X,B}}$$

$$\Delta G_r^0 = \sum_{i=1}^n \nu_i \Delta G_{k,i}^0, \quad \nu_i : \text{sztöchiometriai szám}$$