

Tartalomjegyzék

1. hét: cél, követelményrendszer, tematika, a használandó technika kiválasztása	1
2. hét: bevezetés a (wx)Maxima használatába	1
3. hét: további bevezetés a (wx)Maxima használatába, felhasználói útmutatók (tutorials)	2
4. hét: Bevezető és koncentrációs számolási feladatok	2
5. hét: Sztöchiometriai és kevert feladatok, standard állapot	3
6. hét: gyakorlás	6
7. hét: 1. ZH, példamegoldás	6
8. hét: 1. ZH, egyedi bemutatók	6
9. hét: Egyensúlyok, értelmező ábrák készítése	6
10. hét: Furcsa példák, gyakorlás (még nem végleges!)	7
11. hét: 2. ZH, példamegoldás	8
12. hét: 2. ZH, egyedi bemutatók	8
FÜGGELÉK	9

1. hét: cél, követelményrendszer, tematika, a használandó technika kiválasztása

2. hét: bevezetés a (wx)Maxima használatába

A (wx)Maxima tömör története:

- DARPA, a 2 m\$ grant → 1963: project MAC (Maths and Computers)
- inside MAC: 1968–1982 MIT's MACSYMA (MAC's Symbolic Manipulator)
- 1982–1999 commercial Symbolics Macsyma (and DOE Macsyma for Windows XP is still exists)
- Paralell: 1982 MIT version for US governmental researches
- Bill Schelter tended it from 1982 until his 2001 death
- Macsyma is permitted to GPL'd ? Maxima , XMaxima és (wx)Maxima

Felhasználható irodalom a Maxima használatának elsajátításához:

1. → [Maxima honlap](#)
2. → [Maxima by example](#)
3. → [\(wx\)Maxima honlap](#)
4. → [\(wx\)Maxima tutorial](#) (jó)

3. hét: további bevezetés a (wx)Maxima használatába, felhasználói útmutatók (tutorials)

Ajánlott irodalom a számolási példákhoz:

- K1. Villányi Attila, *Ötösöm lesz kémiából, Példatár*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, ISBN 963 16 2027 1
- K2. Michalovszky Csabáné (felelős szerkesztő), *Összefoglaló feladatgyűjtemény kémiából*, Tankönyvkiadó, Budapest, ISBN 963 17 9417 2
- K3. Peintler Gábor (szerkesztő), *VegyÉSZtorna, Középiskolai Kémiai Feladatmegoldó Verseny*, Mozaik Kiadó, Szeged, ISBN 978 963 697 574 6
- K4. **Kémia érettségi feladatsorok** 1995–2019
- K5. **Periódusos rendszer, tömeggel és hígítással kapcsolatos számolások**
- F1. Próbáljátok ki a **Maxima egyik tutorialjának** WEB-oldalán található bevezető példákat!
- F2. Az angol nyelvű **Introduction to Maxima** egy letölthető PDF file (így offline is használható), ami rengeteg példát tartalmaz, sok ötletet adhat a kémiában is (pl. mértékegység használata).
- F3. A **Symbolic Mathematics for Chemists: A Guide for Maxima Users** egy új könyv a Maxima használatáról a kémiában.
- F4. A **Wolfram Alpha kémiai oldala** gyakorlatilag a Mathematica online kémiai alkalmazása.

4. hét:

Bevezető kémiai számolási példák megoldásához

- F5. Hány gramm ammónium-nitrátot kell 100,0 gramm ammónium-szulfáttal összekeverni, hogy a kapott keverék 24,0 tömegszázalékos legyen nitrogénre nézve? (25,46 g ammónium-nitrát)
- F6. 1,5 kg 90 %-os alkoholt mennyi vízzel hígíthatunk 50 %-osra? (1,2 kg víz)
- F7. Van 2,5 kg 5 %-os oldatunk. Mennyi 20 %-os oldatot kell hozzáadni, hogy 12 %-osat kapjunk? (2,1875 kg oldat)
- F8. Mennyi 10 %-os és 25 %-os oldatot kell összekeverni, hogy 2 kg 20 %-os oldatot kapjunk? (2/3 kg 10 %-os és 4/3 kg 25 %-os oldat)
- F9. Egy karbonsav 11,0 mólszázalékos vizes oldata 24,0 tömegszázalékos. Melyik ez a karbonsav?
- F10. Hány gramm As_2S_3 -ot tartalmaz 100,00 g $\text{As}_2\text{S}_3/\text{As}_2\text{S}_5$ keverék, ha a 100,00 g anyag mind arzénre, mind kénre nézve 50,00–50,00 tömeg%-os? $A_r(\text{As})=74,92$ és $A_r(\text{S})=32,07$. (13,45 g As_2S_3)
- F11. Egy berillium(II)-oxidból (BeO) és magnézium(II)-oxidból (MgO) álló porkeverék pontosan 50,00 tömegszázalék oxigént tartalmaz. Mekkora a keverék mól-, valamint tömegszázalékos összetétele az alkotó fénoxidokra nézve? A relatív atomtömegeket négy tizedesjegy pontossággal használják!
- F12. Egy magnézium(II)-oxidból (MgO) és kalcium(II)-oxidból (CaO) álló porkeverék pontosan 50,00 tömegszázalék oxigént tartalmaz. Mekkora a keverék mól-, valamint tömegszázalékos összetétele az alkotó fénoxidokra nézve? A relatív atomtömegeket kettő tizedesjegy pontossággal használják! (turpisság?!)

Koncentrációs számolási feladatok

- | | | |
|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| F13. K1. : 63B feladat. | F16. K1. : 66B feladat. | F19. K1. : 69B feladat. |
| F14. K1. : 64B feladat. | F17. K1. : 67B feladat. | F20. K1. : 70B feladat. |
| F15. K1. : 62B feladat. | F18. K1. : 61C feladat. | F21. K1. : 71B feladat. |

- F22. **K1.:** 72B feladat. is használjuk, pl. az is
 F23. **K1.:** 73B feladat. függvényt).
 F24. **K1.:** 75B feladat. F31. **K1.:** 97B feladat.
 (A térfogatkontrakció hiányát F32. **K1.:** 98B feladat.
 sajnos feltételezni kell.) F33. **K1.:** 99B feladat.
 F25. **K1.:** 87B feladat. F34. **K1.:** 102B feladat.
 F26. **K1.:** 90B feladat. F35. **K1.:** 102C feladat.
 F27. **K1.:** 92B feladat. F36. **K1.:** 105B feladat.
 F28. **K1.:** 93B feladat. (Nyilvánvaló lenne a
 F29. **K1.:** 95B feladat. differenciálszámítás használata,
 F30. **K1.:** 96B feladat. de középiskolában ezt kerülnük
 (Elegáns megoldás az, ha a el).
 Maxima relációs szolgáltatásait F37. **K1.:** 108B feladat.
 F38. **K1.:** 108C feladat.
 F39. **K1.:** 108D feladat.
 F40. **K1.:** 110B feladat.
 F41. **K1.:** 111B feladat.
 F42. **K1.:** 112B feladat.
 F43. **K1.:** 113B feladat.
 F44. **K1.:** 114B feladat.
 F45. **K1.:** 115B feladat.
 F46. **K1.:** 116B feladat.
 F47. **K1.:** 117B feladat.
 F48. **K1.:** 120B feladat.
 F49. **K1.:** 124B feladat.
 F50. **K4.:** középszint, 2009. május 5B. A megadott megoldás hol követ el olyan kerekítési hibát,
 amely a harmadik értékes jegyet is érinti? (15,088 tömegszázalék a pontosan számolt összetétel)
 F51. **K4.:** emelt szint, 2009. május 8b és 8c. Próbáljátok meg egy egyenletrendszer és nemcsak egy
 egyenlet felírásával és megoldásával megkapni a végeredményt.
 (59,7 mólszázalék étén a pontosan számolt összetétel)

5. hét:

Sztöchiometriai feladatok

- F52. **K1.:** 129B feladat. F55. **K1.:** 135B feladat.
 F53. **K1.:** 130B feladat. (A könyvben el van írva a
 (Elegáns megoldás az, ha a sorszám, legalábbis a
 Maxima relációs szolgáltatásait 4. kiadásban.)
 is használjuk, pl. az is F56. **K1.:** 139. feladat.
 függvényt). F57. **K1.:** 141. feladat.
 F54. **K1.:** 134B feladat. F58. **K1.:** 142. feladat.
 (Mi a bizonytalanság az ilyen F59. **K1.:** 144. feladat.
 típusú feladatokban?) F60. **K1.:** 145. feladat.
 F61. **K1.:** 147B feladat.
 F62. **K1.:** 150. feladat.
 F63. **K1.:** 151. feladat.
 F64. **K1.:** 154B feladat.
 F65. **K1.:** 155B feladat.
 F66. **K1.:** 155C feladat.
 F67. **K1.:** 156C feladat.
 F68. **K1.:** 157B feladat.
 F69. **K1.:** 157C feladat.

Kevert koncentrációs számolási és sztöchiometriai feladatok

- F70. (**K3.:** I-3.2 feladat) Kalcium-karbonátot használunk egy sósavoldat, valamint egy lúgoldat pontos koncentrációinak meghatározásához. 1,000 g CaCO_3 -ot 49,85 cm³ HCl-oldatban oldunk. A sav feleslegének visszatitrálásához 6,32 cm³ NaOH-oldat fogy. Külön kísérletben titrálunk 50,00 cm³ HCl-oldatot, erre 48,95 cm³ NaOH-oldat fogy. Számítsuk ki a HCl- és a NaOH-oldatok pontos koncentrációját!
 ($c_{\text{sav}}=0,4605 \text{ M}$ és $c_{\text{bázis}}=0,4704 \text{ M}$)
 F71. (**K3.:** I-4.3 feladat) 0,5000 g kloridot, bromidot és inert anyagot tartalmazó mintából 0,9000 g, AgCl-ot és AgBr-ot tartalmazó csapadékkeveréket választottunk le. Ha ezt a csapadékot klór-áramban hevítjük, a csapadék súlyvesztése 0,1000 g. Számítsuk ki, hogy hány tömegszázalék kloridot, illetve bromidot tartalmazott a minta!
 (23,63 tömegszázalék klorid és 35,95 tömegszázalék bromid)
 F72. (**K3.:** I-5.1 feladat) Hány tömegszázalék szén tartalmaz az a Mg_2C és MgC_2 -ből álló karbidkeverék, melynek 0,8500 g-ját elhidrolizáltatva, majd a képződött gázt elégetve 0,4779 g víz

képződik. A karbidok hidrolízise során 1 mol Mg_2C -ből 1 mol CH_4 , illetve 1 mol MgC_2 -ből 1 mol C_2H_2 képződik. (24,15 tömegszázalék szén)

- F73. (K3.: II-1.3 feladat) Adott nyomású, szobahőmérsékletű, metánt és acetilént tartalmazó gázelegy $63,0\text{ cm}^3$ -ének tökéletes elégetése után a kapott gáz térfogata a kiindulási nyomáson és hőmérsékleten $96,0\text{ cm}^3$ -ra. Mi volt a gázelegy mól- és térfogatszázalékos összetétele?

(47,6 % metán és 52,4 % acetilén mindkét koncentráció-mértékegységben)

- F74. (K3.: II-2.2 feladat) Fémcinket oldottunk kénsavoldatban. A reakció után kivált kristályvíztartalmú vegyület kéntartalma 11,15 tömegszázalék. Hány mol vizet tartalmaz a kristályvíztartalmú vegyület egy mola? Elvileg hány tömegszázalékos kénsavoldatban kell a cinket feloldanunk ahhoz, hogy ha a H_2SO_4 -tartalommal sztöchiometrikus mennyiségű cinket oldunk, akkor a hidrogéngáz eltávolítása után az oldat egésze kikristályosodjék?

(7 kristályvíz és 43,75 tömegszázalékos oldat kell)

- F75. (K3.: II-2.3 feladat) $60,0\text{ g}$, 16,0 tömegszázalékos sóoldatból $20,0\text{ g}$ tömegű részletet átöntünk 180 g tömegű, x tömegszázalékos, azonos sóból készült sóoldatba. Alapos összekeverés után most ebből veszünk ki $20,0\text{ g}$ tömegű részletet, és visszaöntjük a maradék 16,0 tömegszázalékos oldatba. Az öntögetések és a keverés eredményeként az eredetileg 16,0 tömegszázalékos oldat töménysége 13,0 tömegszázalékra csökkent. Hány tömegszázalékos volt a kiindulási 180 g tömegű oldat az összeöntés előtt?

(6,00 tömegszázalékos oldat kell)

- F76. (K3.: I-1.4 feladat) Egy porkeverék alumíniumot, rezet és inert szennyeződést tartalmaz. Ha a porkeverék $0,1000\text{ g}$ -ját $300,0\text{ cm}^3$ $0,0100\text{ M}$ sósavoldathoz adjuk, akkor az oldatban a pH értéke 2,678 lesz a gázfejlődés befejeződése után. Ezután a rendszerhez $200,0\text{ cm}^3$ $0,03\text{ M}$ salétromsavoldatot adva, a nitrogén-dioxid fejlődés után az oldat pH -értéke 2,347-re változik. Adjuk meg a porkeverék tömegszázalékos összetételét!

(21,32 tömegszázalék Al, 69,60 tömegszázalék Cu és 9,08 tömegszázalék inert anyag)

- F77. (K3.: III-1.3 feladat) Egy szilárd minta két vízmentes ezüst-halogenid keverékéből áll. A minta $0,3236\text{ g}$ -nyi mennyiségét $50,00\text{ cm}^3$ $0,1810\text{ M}$ kálium-cianid-oldatban oldottuk. A feleslegben maradt cianidot $28,14\text{ cm}^3$ $0,1010\text{ M}$ ezüst-nitrát mérőoldattal mértük vissza. Számítsuk ki a keverék tömegszázalékos ezüsttartalmát! Feltételezve, hogy a két halogenid a klorid és a jodid volt, számítsuk ki a mintában a klorid és a jodid tömegét is.

(56,10 tömegszázalék ezüst, $0,0277\text{ g}$ klorid és $0,1144\text{ g}$ jodid)

- F78. (K3.: II-5.3 feladat) A kalcium atomsúlyának (értsd abban az időben: hidrogénhez viszonyított relatív atomtömegének) meghatározásához Berzelius 1843-ban kalcium-oxidot alakított át kalcium-szulfáttá kénsavas kezeléssel úgy, hogy a kénsav feleslegét hevítéssel eltávolította. Egyik kísérlete során a kiindulási anyag $25,04\text{ g}$ -jából $60,36\text{ g}$ termék képződött. Mennyinek találta Berzelius a Ca atomsúlyát ezen mérés alapján, ha a tudós akkori ismerete szerint a kén atomsúlya 32,40 volt, míg az oxigénéé 16,03?

(41,03 a kalcium atomsúlya Berzelius szerint)

- F79. (K3.: II-5.4 feladat) Az egyik legismertebb magyar ételízesítő nátrium-klorid-tartalmát a következőképpen határoztuk meg:

A sűrítmény $20,00\text{ g}$ -ját desztillált vízzel főztük, lehűlés után aktív szén hozzáadásával elszíntelenítettük, majd leszűrtük, és a szűrlet térfogatát desztillált vízzel $100,0\text{ cm}^3$ -re állítottuk be. A szűrletből $10,00\text{ cm}^3$ mintát vettünk, ezt desztillált vízzel $100,0\text{ cm}^3$ -re hígítottuk, majd ebből az oldatból vettünk $10,00\text{ cm}^3$ -es mintákat, melyekhez $8,45\text{ cm}^3$ $0,06000\text{ M}$ koncentrációjú ezüst(I)-nitrát-oldatot, valamint salétromsavat és kálium-nitrátot adtunk. Forraltuk, hogy az ezüst-klorid-csapadék tömörödjön, majd vas(III)-nitrát indikátort adtunk az oldathoz. Az ezüst(I)-ion feleslegét $0,01000\text{ M}$ kálium-tiocianát-oldattal (KSCN) titráltuk, melyből átlagosan $26,65\text{ cm}^3$ fogyott. Hány tömegszázalékos a népszerű ételízesítő nátrium-kloridra nézve?

(7,03 tömegszázalékos volt a nátrium-klorid a sűrítményben)

- F80. (K3.: I-1.8 feladat) Egy nátriumot és káliumot is tartalmazó amalgám $1,0000\text{ g}$ -ját $150,0\text{ cm}^3$ desztillált vízbe tesszük és rázatjuk. Az alkálifémek kioldódása után a maradék higany tömege $0,9187\text{ g}$. Az oldat $20,00\text{ cm}^3$ -ét $0,0500\text{ M}$ sósavoldattal megcitrálva $8,22\text{ cm}^3$ sav fogy. Mennyi

volt az eredeti amalgám mólszázalékos összetétele?

(31,78 mólszázalék Na, 8,45 mólszázalék K és 59,77 mólszázalék Hg)

- F81. (K3.: I-3.7 feladat) 5,000 g, kalcium-karbonátból és fémkalciumból álló porkeveréket oldunk feleslegben lévő 1,0 M sósavoldatban. Az oldás eredményeként $1,783 \text{ dm}^3$ $37,30^\circ\text{C}$ -os, 1,000 bar nyomású gáz keletkezik. Mennyi volt a porkeverék tömegszázalékos és a fejlődött gázelegy térfogatszázalékos összetétele?

(74,43 tömegszázalék CaCO_3 , 25,57 tömegszázalék Ca; 53,82 térfogatszázalék az egyik összetevőre)

Eddigiek + standard állapot probléma

- F82. (K3.: I-3.7 feladat) 5,000 g, kalcium-karbonátból és fémkalciumból álló porkeveréket oldunk feleslegben lévő 1,0 M sósavoldatban. Az oldás eredményeként $1,783 \text{ dm}^3$ $37,30^\circ\text{C}$ -os, 1,000 bar nyomású gáz keletkezik. Mennyi volt a porkeverék tömegszázalékos és a fejlődött gázelegy térfogatszázalékos összetétele?

(74,43 tömeg% CaCO_3 , 25,57 tömeg% Ca; 53,82 térfogat% ? gáz és 46,18 térfogat% ? gáz)

- F83. (K3.: I-4.7 feladat) Egy ötvözet a periódusos rendszer két egymást követő alkáliföldféméből áll. Az ötvözet 4,500 g-ját sósavban feloldva $3,332 \text{ dm}^3$ standardállapotú H_2 fejlődik. (a) Mi az ötvözetet alkotó két fém? (b) Mi az ötvözet tömeg-, illetve mólszázalékos összetétele?

(32,85 tömeg% és 44,64 mól% a kisebb moláris tömegű fémre)

- F84. (K3.: II-1.6 feladat) Egy fémötvözet alumíniumot, vasat és ezüstöt tartalmaz. Az ötvözet 0,4938 g-ját 0,1 M HCl-ban oldva $268,90 \text{ cm}^3$, $23,50^\circ\text{C}$ -os, 1,053 bar nyomású gáz fejlődik. Ha az ötvözet 0,4743 g-ját 0,1 M NaOH-oldatban oldjuk, akkor $108,58 \text{ cm}^3$, $23,50^\circ\text{C}$ -os, 1,032 bar nyomású gáz keletkezik. Mi volt a keverék tömegszázalékos és mólszázalékos összetétele?

(17,23 tömeg% Al, 76,35 tömeg% Fe és 6,42 tömeg% Ag, illetve 30,92 mól% Al, 66,20 mól% Fe és 2,88 mól% Ag)

- F85. (K3.: III-2.5 feladat) Egy porkeverék öt vegyületből áll: kalcium-karbonát, vas, alumínium, réz és cink. A keverék 15,00 g-jához feleslegben sósavat adva a szilárd maradék tömege szűrés és szárítás után 3,85 g. A reakció során fejlődött gáz térfogata 0,1 MPa nyomáson és $293,0 \text{ K}$ -en $3,96 \text{ dm}^3$. A gázt KOH-oldaton átbuborékolgatva nyomása (azonos térfogat és hőmérséklet mellett) a felére csökken. A porkeverék újabb 5,00 g-jához feleslegben NaOH-oldatot adunk. Ekkor $0,560 \text{ dm}^3$ 0,1 MPa nyomású gázt kapunk $293,0 \text{ K}$ -en. Mi a porkeverék tömegszázalékos összetétele?

(54,2, 4,6, 5,5, 25,7 és 10,0 tömeg% CaCO_3 , Fe, Al, Cu és Zn)

- F86. (K3.: V-1.6 feladat) Vas(II)-karbonátból és fémvasból álló keverék 6,223 g-ját oldjuk feleslegben lévő sósavoldatban, miközben $1,873 \text{ dm}^3$ normálállapotú gáz keletkezik. Mennyi volt a keverék tömegszázalékos összetétele? Mi a keletkezett gázelegy térfogatszázalékos összetétele?

(48,27 tömeg% FeCO_3 , 51,73 tömeg% Fe és 68,98, valamint 31,02 térfogat%-ok a fejlődő gázokra)

- F87. (K3.: V-1.8 feladat) Egy ismeretlen vegyület bórt, nitrogént és hidrogént tartalmaz, amelynek gőze 2,51-szer nehezebb az oxigéngáz azonos térfogatánál ugyanazon körülmények között. A vegyület 0,5000 g-ját oxigénfeleslegben elégetve az égéstermék bór(III)-oxidot, vizet és $0,208 \text{ dm}^3$ normálállapotú nitrogéngázt tartalmaz. Ha az égésterméket 150°C -ra melegítjük, akkor a gázállapotú égéstermékek össztérfogata $0,967 \text{ dm}^3$ lesz. Mi a vegyület molekulaképlete és az égés egyenlete?

($\text{B}_3\text{N}_3\text{H}_6$ a molekulaképlet)

6. hét: gyakorlás

7. hét: 1. ZH, példamegoldás

8. hét: 1. ZH, egyedi bemutatók

9. hét: Egyensúlyok, értelmező ábrák készítése

- F88. 25 °C-on a vízionszorzat értéke $K_v=1,74 \times 10^{-14} \text{ M}^2$, míg a benzoésav savi disszociációs állandója $K_d=6,3 \times 10^{-5} \text{ M}$. Készítsetek a Maxima segítségével egy ábrát, amely a benzoésav koncentrációjának függvényében felrajzolja az oldat (a) pontos pH-ját a (3) vagy (4) egyenlettel számolva, (b) egy közelítő pH-át az (5) egyenlettel számolva, (c) valamint egy másik közelítő pH-át a (6) egyenlettel számolva. A sav analitikai koncentrációjának érdemes logaritmikus beosztást használni a $1,0 \times 10^{-10}$ – $0,3 \text{ M}$ tartományban. Elemezzétek az ábrát abból a szempontból, hogy milyen koncentrációtartományokban lehet használni a gyakorlatban a közelítő képleteket!
- F89. Az F88. feladatban megadott adatok felhasználásával keressétek meg a benzoésav legnagyobb (analitikai) koncentrációértékét három értékes jegy pontossággal, amelynél a függelékben levezetett (3) vagy (4) egyenlete alapján számolható pontos pH legfeljebb 0,002; 0,01; 0,1 és 0,3 pH-egységgel különbözik az (5) és (6) egyenletekből számolható közelítő értékektől.
- F90. Készítsetek a Maxima segítségével egy ábrát, amely megadja egy egyértékű erős sav c koncentrációjú oldatának pH-értékét közelítő, illetve pontos formulával! A közelítő pH a $\text{pH} \cong -\lg c$ összefüggés alapján számolandó; a pontos pH a $\text{pH} = -\lg[\text{H}^+]$ definíció alapján, ahol $[\text{H}^+]$ a megoldása a $c = [\text{H}^+] - [\text{OH}^-] = [\text{H}^+] - K_v/[\text{H}^+]$ anyagmérleg-egyenletnek. A vízionszorzat pontos értéke $K_v=1,74 \times 10^{-14} \text{ M}^2$. A sav analitikai koncentrációjának érdemes logaritmikus beosztást használni a $c=1 \times 10^{-5}$ – $1 \times 10^{-9} \text{ M}$ tartományban. Elemezzétek az ábrát abból a szempontból, hogy milyen koncentrációtartományokban lehet használni a gyakorlatban a közelítő képletet! A fenti anyagmérleg-egyenlet átrendezve egy $[\text{H}^+]$ -ra nézve másodfokú egyenlethez vezet, ennek csak az egyik megoldása lehet kémiaiilag értelmes. Az egyik lehetséges megoldás, hogy végrehajtjuk ezt az átrendezést, kiválasztjuk a kémiaiilag értelmes megoldást, majd ezt a kifejezést használjuk a Maxima -ban. Azonban a Maxima implicit módon megadott függvényeket is képes ábrázolni akár az `implicit_plot` csomaggal, akár a `draw` csomag implicit függvény megadási módjának segítségével. Mindkét megoldási mód jó, de ez utóbbi nem követeli meg az anyagmérleg-egyenlet átalakítását.
- F91. Az F90. feladatban megadott adatok felhasználásával válaszoljátok meg a következő kérdéseket, egymondatos indoklást is adva:
- Melyik pH-tartományban kisebb a közelítő formula hibája 0,01 pH-egységnél?
 - Melyik pH-tartományban nagyobb a közelítő formula hibája 0,1 pH-egységnél?
 - Melyik az a pH-tartomány, amelyben a közelítő formula hibája egy pH-egységnél is nagyobb?
- F92. Az F90. feladatban megadott adatok felhasználásával válaszoljátok meg a következő kérdéseket, egymondatos indoklást is adva:
- Melyik analitikai koncentrációtartományban kisebb a közelítő formula hibája 0,01 pH-egységnél?
 - Melyik analitikai koncentrációtartományban nagyobb a közelítő formula hibája 0,1 pH-egységnél?
 - Melyik az az analitikai koncentrációtartomány, amelyben a közelítő formula hibája egy pH-egységnél is nagyobb?

- F93. Az F88.–F92. feladatokhoz hasonlóan, válasszatok egy tetszőleges puffert (pl. ecetsav/acetát vagy hidrogénkarbonát/karbonát, stb.), és vagy a savi forma, vagy a bázikus forma koncentrációjának függvényében készítenek ábrákat és/vagy végezzenek számolásokat, amelyek megmutatják, hogy a (3) vagy (4) egyenlettel számolható pontos pH-t mennyire jól közelítik a (7–9) egyenletekből számolható közelítő értékek.
- F94. Hány gramm kristályos réz(II)-szulfátot ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) kell 58 g vízben feloldani ahhoz, hogy az oldat tömegszázalékos összetétele m legyen? Készítenek egy olyan ábrát, amely a szükséges kristályos réz(II)-szulfát tömegét ábrázolja a tömegszázalékos összetétel függvényében a 0–100 tartományban! Ha tapasztaltok szokatlan változást az ábrázolt görbén, próbáljátok megadni annak (kémiai) okát!
- Próbáljátok meg az ábrát elkészíteni explicit és implicit módon is, logaritmikus y -skálával, és értelmezzétek az esetleges eltéréseket!
- F95. Egy $1,000 \text{ dm}^3$ -es zárt edény kezdetben n mol hidrogéngázt és $0,300$ mol jódgőzt tartalmaz. Az edényben a két anyag között a

$$\text{H}_2 + \text{I}_2 \rightleftharpoons 2\text{HI}, \quad K = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2] \cdot [\text{I}_2]} = \frac{[\text{HI}]^2}{\left(n - \frac{[\text{HI}]}{2}\right) \cdot \left(0,3 - \frac{[\text{HI}]}{2}\right)} = \frac{(2 \cdot (0,3 - [\text{I}_2]))^2}{(n - (0,3 - [\text{I}_2])) \cdot [\text{I}_2]}$$

egyensúlyi reakció játszódik le, ahol az egyensúlyi állandó értéke $0,871$ a reakció hőmérsékletén; és értéke kifejezhető akár a HI, akár a I_2 egyensúlyi koncentrációjával a sztöchiometriai kapcsolatok figyelembevételével, ahogy azt a fenti kifejezések mutatják. Készítenek két ábrát, amelyek mindegyike a jódgőz és a hidrogénjodid egyensúlyi koncentrációját mutatja a hozzáadott hidrogéngáz anyagmennyiségének függvényében. Az ábráknál a következőket vegyék figyelembe:

- Az első ábrához fejezzétek ki a fenti egyenletekből a HI és a I_2 koncentrációját, készítenek Maxima függvénydefiníciókat a kémiailag értelmes megoldásból (ld. define függvény) és ezeket ábrázoljátok.
- A második esetben használjátok a Maxima implicit függvényábrázolási lehetőségeit. Próbáljátok meg értelmezni, miért nem 100 %-osan sikeres ez a módszer?
- A megadott $0,871$ -es érték az egyensúlyi állandóra valós adat. Miért nem célszerű ezt egyszerűsíteni?

10. hét: Furcsa példák, gyakorlás (még nem végleges!)

Az eredmény túl érzékeny a kiindulási adatok pontosságára

- F96. (K3.: III-5.1 feladat) $2,604 \text{ g}$ óleum közömbösítéséhez $65,1 \text{ cm}^3$ $0,900 \text{ M}$ NaOH-oldat szükséges. Számítsátok ki a szabad $\text{SO}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$ tömegarányt az eredeti óleum mintában! A számításokat három módon végezzétek el: (1) pontosan a függelékben megadott relatív atomtömegeket használjátok, (2) a relatív atomtömegek számértékét $0,01$ pontosságra kerekítve használjátok, valamint (3) a relatív atomtömegek számértékét egész számra kerekítsétek a számolásokhoz. Az arányt három tizedes jegy pontossággal adjátok meg!

$$(m_{\text{SO}_3}/m_{\text{H}_2\text{SO}_4} = (1) 0,850; (2) 0,852 \text{ és } (3) 0,837)$$

- F97. (K3.: IV-1.3 feladat) Réz(II)- és nikkel(II)-ionokat együttesen tartalmazó oldatból a fémek elektrolízissel történő teljes kiválasztásához $345,0 \text{ C}$ töltésmennyiség szükséges. A kivált fémek együttes tömege $0,1110 \text{ g}$. A kivált fém hány tömegszázaléka nikkel, illetve réz? A számításokat három módon végezzétek el: (1) pontosan a függelékben megadott relatív atomtömegeket használjátok, (2) a relatív atomtömegek számértékét $0,1$ pontosságra kerekítve használjátok, valamint (3) a relatív atomtömegek számértékét egész számra kerekítsétek a számolásokhoz.

A tömegszázalékos értékeket egy tizedes jegy pontossággal adjátok meg!

((1) 71,6/28,4 m/m% Cu/Ni; (2) 70,8/29,2 m/m% Cu/Ni és (3) 63,6/36,4 m/m% Cu/Ni)

Az eredmény túl érzékeny a köztes számítások pontosságára

- F98. (K3.: VIII-3.5 feladat) Összeöntünk két térfogatrész telített ezüst(I)-szulfát oldattal egy térfogatrész telített ólom(II)-klorid oldatot, majd az így kapott elegyet felforraljuk. Szobahőmérsékletre történő lehűlést követően mekkorák lesznek az egyensúlyi oldatban az ionok egyensúlyi koncentrációi? Az összeöntés során bekövetkező térfogat kontrakciótól eltekintünk, valamint a forralás során fellépő oldószer veszteséget pótoljuk. A számolásokat végezzétek el különböző pontosságokkal is (16, 10, 9, 7, 6, 5, 4 és 3 értékes jeggyel) a Maxima fpprec változója, valamint a bigfloat számok használatával! A végeredményeket három értékes jegy pontossággal adjátok meg. Az oldhatósági szorzatok: $L_{\text{Ag}_2\text{SO}_4}=7,70\times 10^{-5} \text{ M}^3$, $L_{\text{PbCl}_2}=1,00\times 10^{-4} \text{ M}^3$, $L_{\text{AgCl}}=1,56\times 10^{-10} \text{ M}^2$ és $L_{\text{PbSO}_4}=1,83\times 10^{-8} \text{ M}^2$.

$n^\dagger$	c_{Ag^+}	$c_{\text{Pb}^{2+}}$	$c_{\text{SO}_4^{2-}}$	c_{Cl^-}
10, 11, ...	$1,62\times 10^{-2}$	$2,25\times 10^{-6}$	$8,12\times 10^{-3}$	$9,61\times 10^{-9}$
9	$1,62\times 10^{-2}$	$2,25\times 10^{-6}$	$8,12\times 10^{-3}$	$9,60\times 10^{-9}$
7	$1,62\times 10^{-2}$	$2,25\times 10^{-6}$	$8,12\times 10^{-3}$	$9,31\times 10^{-9}$
6	$1,62\times 10^{-2}$	$2,25\times 10^{-6}$	$8,12\times 10^{-3}$	$1,49\times 10^{-8}$
5	$1,62\times 10^{-2}$	$2,29\times 10^{-6}$	$8,12\times 10^{-3}$	$0,00\times 10^{+0}$
4	$1,62\times 10^{-2}$	$2,38\times 10^{-6}$	$8,12\times 10^{-3}$	$-4,77\times 10^{-7}$
3	$1,62\times 10^{-2}$	$3,81\times 10^{-6}$	$8,12\times 10^{-3}$	$0,00\times 10^{+0}$

[‡] n a számolásokban az értékes jegyek száma

- F99. (K3.: II-2.6 feladat)

- F100. (K3.: II-2.8 feladat)

- F101. (K3.: II-5.7 feladat)

- F102. (K3.: II-3.8 feladat)

- F103. (K3.: V-2.8 feladat)

11. hét: 2. ZH, példamegoldás

12. hét: 2. ZH, egyedi bemutatók

9

A Brønsted-egyenlet levezetése és egyszerűsített formái

Jelölések:

- S egy egyértékű gyenge sav (az esetleges töltések nincsenek jelölve),
- B a gyenge sav konjugált bázisa (deprotonált formája, az esetleges töltések is sincsenek feltüntetve),
- [S] a sav egyensúlyi koncentrációja,
- [B] a bázis egyensúlyi koncentrációja,
- c_S a sav bemérési (más néven analitikai) koncentrációja,
- c_B a bázis bemérési (vagy analitikai) koncentrációja,
- $[H^+]$ a hidrogénion (vagy pontosabban hidroxóniumion) egyensúlyi koncentrációja,
- $[OH^-]$ a hidroxidion egyensúlyi koncentrációja,
- K_v a víziószorzat,
- K_d a gyenge sav disszociációs egyensúlyi állandója, valamint
- $pH = -\lg[H^+]$.

A Brønsted-egyenlet segítségével kiszámolhatjuk olyan oldatok hidrogénion koncentrációját, – vagy ami ezzel egyenértékű, a pH-ját, – amelyekben az oldott anyag egy egyértékű gyenge sav és/vagy annak konjugált bázisa. Az ilyen oldatokban a következő két egyensúly játszik szerepet: $S \rightleftharpoons B + H^+$ (vagy más formában $S + OH^- \rightleftharpoons B + H_2O$), valamint $H^+ + OH^- \rightleftharpoons H_2O$.

Az egyenlet levezetése

Az oldatban érvényes anyagmérleg egyenletek:

$$c_S = [S] + [H^+] - [OH^-] \quad \text{és} \quad c_B = [B] + [OH^-] - [H^+], \quad (1)$$

valamint az egyensúlyokat leíró tömeghatás egyenletek:

$$K_d = \frac{[H^+] \cdot [B]}{[S]} \quad \text{és} \quad K_v = [H^+] \cdot [OH^-]. \quad (2)$$

A (2) első egyenletéből a hidrogénion koncentrációját kifejezve, majd az (1) egyenletekből a sav és a bázis egyensúlyi koncentrációit behelyettesítve, és végül a hidroxidion koncentrációját a víziószorzatot megadó egyenletből kifejezve:

$$[H^+] = K_d \cdot \frac{[S]}{[B]} = K_d \cdot \frac{c_S - [H^+] + [OH^-]}{c_B + [H^+] - [OH^-]} = \boxed{[H^+] = K_d \cdot \frac{c_S - [H^+] + \frac{K_v}{[H^+]}}{c_B + [H^+] - \frac{K_v}{[H^+]}}}, \quad (3)$$

ahol a bekeretezett rész a Brønsted-egyenlet. Megfelelő átalakításokkal ennek polinomiális formáját is megkaphatjuk (szintén bekeretezve az alábbi egyenletek között). Ha ennek az egyenletnek a bal oldalát függvényként fogjuk fel, akkor annak deriváltjai segítségével a Brønsted-egyenlet tulajdonságai könnyen elemezhetők.

$$\begin{aligned} f([H^+]) &= [H^+]^3 + (c_B + K_d) \cdot [H^+]^2 - (K_v + K_d \cdot c_S) \cdot [H^+] - K_d \cdot K_v = 0 \\ f'([H^+]) &= 3 \cdot [H^+]^2 + 2 \cdot (c_B + K_d) \cdot [H^+] - (K_v + K_d \cdot c_S) \\ f''([H^+]) &= 6 \cdot [H^+] + 2 \cdot (c_B + K_d) \end{aligned} \quad (4)$$

Az egyszerűsített pH-számoló formulák gyenge sav esetén

Gyenge sav oldatában nincs oldott bázis és a hidrogénion koncentrációja mellett a hidroxidioné elhanyagolható:

$$[H^+] = K_d \cdot \frac{c_s - [H^+]}{[H^+]} \longrightarrow \boxed{[H^+]^2 + K_d \cdot [H^+] - K_d \cdot c_s = 0} \quad (5)$$

Ha még a disszociáció mértéke is kicsi (nem több 1–2 %-nál), akkor a röviden gyökös képletnek nevezett összefüggés lesz érvényes:

$$[H^+] = K_d \cdot \frac{c_s}{[H^+]} \longrightarrow \boxed{[H^+] = \sqrt{K_d \cdot c_s}} \quad (6)$$

A konjugált bázisok oldataiban hasonló módon lehet az egyszerűsített formulákat megkapni.

Az egyszerűsített pH-számoló formulák pufferek esetén

A hozzáadott bázis visszaszorítja a gyenge sav disszociációjának mértékét, ezért a $0,1 < c_s/c_B < 10$ tartományban a bemérési koncentrációkhoz képest mind a hidrogén, mind a hidroxid egyensúlyi koncentrációja elhanyagolható (egyszerű pufferképlet):

$$[H^+] = K_d \cdot \frac{c_s}{c_B} \longrightarrow \boxed{[H^+] = K_d \cdot \frac{c_s}{c_B}} \quad (7)$$

Egyéb arányoknál az így számolt hidrogénion koncentráció csak közelítő. Ha ez az érték savas oldatra utal, akkor csak a hidroxidion koncentrációja hanyagolható el, és a pontosabb, ún. másodfokú pufferképletet kell használni:

$$[H^+] = K_d \cdot \frac{c_s - [H^+]}{c_B + [H^+]} \longrightarrow \boxed{[H^+]^2 + (K_d + c_B) \cdot [H^+] - K_d \cdot c_s = 0} \quad (8)$$

Ha az egyszerű pufferképletből számolt hidrogénion lúgos kémhatást jelez, de kívül vagyunk a fent jelzett koncentrációtartományon, akkor csak a hidrogénion koncentrációja hanyagolható el, és egy pontosabb, szintén másodfokú egyenletet kell megoldani:

$$[H^+] = K_d \cdot \frac{c_s + \frac{K_v}{[H^+]}}{c_B - \frac{K_v}{[H^+]}} \longrightarrow \boxed{c_B \cdot [H^+]^2 - (K_v + K_d \cdot c_s) \cdot [H^+] - K_d \cdot K_v = 0} \quad (9)$$