

Zárthelyi dolgozat**PPKE Információs Technológiai Kar****Biofizika, Molekuláris biológia****2009. október 21.**Név:..... *Vékes Eszter***Olvashatóan!**

Csak a feladatok között kijelölt helyekre beírt eredményeket értékeljük. A papír hátoldalára, illetve bármilyen más papírra lehet ugyan piszkozatot készíteni, ezeket azonban az értékelésnél nem vesszük figyelembe. Célszerű ezért a feladatok között kihagyott helyekre (kijelölt helyek) a letisztázott levezetéseket és a végeredmény(ek)e)t beírni. Levezetés nélküli végeredmény nem értékelhető! A levezetések legyenek világosak és követhetőek. A végeredmények megadásakor ne feledkezzenek meg a mértékegységekről! A tesztkérdéseknél csak egy helyes válasz adható meg.

Pontszám

Feladatok	Elérhető	Tényleges
Tesztkérdések	30	30P
1.	10	10P
2.	10	10P
3.	15	15
4.	20	20
5.	15	15
Összesen	100	100

Tesztkérdések és rövid válaszok:

1.) Egy másodrendű reakció sebességi állandójának mértékegysége:

- A.) M nap
- B.) M^{-1}
- ☒ C.) $M^{-1} h^{-1}$
- D.) min
- E.) s^{-1}

$$\frac{M}{s} = (k) M^2$$

$$(k) = \frac{1}{s M}$$

2.) Ha egy fehérjemolekuláról 3 Na^+ ion disszociál, hogyan változik meg az ozmózis nyomás?

- A.) kétszeresére nő
- B.) háromszorosára nő
- ☒ C.) négyszeresére nő
- D.) negyedrészt csökken

3.) Mi a kémiai potenciál, μ , definíciója?

A.) $0 = n_1 d\mu_1 + n_2 d\mu_2$

☒ B.) $\mu_1 = \left(\frac{\partial G}{\partial n_1} \right)_{T, P, n_2}$

C.) $\mu_1 = \mu_1^0 + RT \ln X_1$

D.) $\left(\sum_i n_i d\mu_i \right)_{T, P} = 0$

E.) $\frac{d\mu_1}{dX_1} = \frac{RT}{X_1}$

4.) Hogyan határozhatjuk meg grafikusán egy reakció aktiválási energiáját?

- A.) Az egyensúlyi állandó logaritmusát ábrázoljuk a hőmérséklet függvényében.
- B.) Az egyensúlyi állandó reciprokát ábrázoljuk a hőmérséklet logaritmusának függvényében.
- ☒ C.) A sebességi állandó logaritmusát ábrázoljuk a hőmérséklet reciprokának függvényében.
- D.) A sebességi állandót ábrázoljuk a hőmérséklet reciprokának függvényében.
- E.) ΔG^0 értékét ábrázoljuk a hőmérséklet logaritmusának függvényében.

$$k = A \cdot e^{-E^*/RT}$$

$$\ln k = \ln A + \frac{-E^*}{RT}$$

$$m = \frac{-E^*}{R}$$

5.) Egészítse ki a következő mondatot:

A Donnan potenciált leíró összefüggés levezetésénél egyenlővé tesszük az anion vagy a kation elektrokémiai potenciál-ját a féligáteresztő membrán két oldalán.

6.) Mi az aktivitási koefficiens dimenziója?

- A.) koncentráció
- B.) koncentráció/idő
- ☒ C.) koncentráció/térfogat
- D.) 1/koncentráció
- ☒ E.) nincs dimenziója

7.) Mire következtethetünk egy rendszer ΔG értékéből?

- A.) Arra, hogy a rendszer milyen távol van az egyensúlytól
- B.) Arra, hogy milyen gyorsan jut el a rendszer az egyensúlyba
- C.) Arra, hogy hány komponensű a rendszer
- D.) Arra, hogy a rendszer mennyi hőt képes átadni környezetének

8.) Mikor egyenlő egy adott anyag kémiai potenciálja két különböző fázisban egyensúly esetén?

- A.) Mindig
- B.) Csak ha az adott anyag szabadon át tud lépni egyik fázisból a másikba
- C.) Csak ha az adott anyag nem disszociál ionokra
- D.) Csak ha a fázisokat nem választja el féláteresztő membrán

9.) Melyik koncentrációegység független a hőmérséklettől és a nyomástól?

- A.) Móltört $x = \frac{n_1}{n_1 + n_2}$
- B.) Molaritás
- C.) Vegyszázalék
- D.) Térfogatszázalék

10.) Az alábbiak közül mi jellemző a kolligatív tulajdonságokra?

- A.) Értéke független a hőmérséklettől.
- B.) Értéke függ az anyagi minőségtől.
- C.) Értéke függ a részecskék méretétől.
- D.) Értéke csak a részecskék számától függ.
- E.) Értéke független a koncentrációtól.

Számolási feladatok:

- 1.) Ha egy elsőrendű reakció relaxációs ideje (τ : az az idő, mely alatt a reaktáns kezdeti koncentrációja $1/e$ részére csökken) 4s, akkor mekkora a sebességi állandója ennek a reakciónak, és mekkora a felezési idő?

Válaszát levezetéssel is indokolja!

$$\tau = 4s \rightarrow \boxed{\lambda = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{4s}} \quad \text{a sebességi állandó}$$

felezési idő: $t_{1/2} = ?$

$$[A](t) = [A_0] \cdot e^{-\lambda t}$$

$$[A](t_{1/2}) = [A_0] \cdot e^{-\lambda t_{1/2}}$$

$$\frac{[A_0]}{2} = [A_0] \cdot e^{-\lambda t_{1/2}}$$

$$\ln \frac{1}{2} = -\lambda t_{1/2} \quad \checkmark$$
$$t_{1/2} = -\frac{\ln \frac{1}{2}}{\lambda} = -\frac{\ln \frac{1}{2}}{\frac{1}{4}} = \underline{\underline{2,7726 \text{ sec}}}$$

2.) Egy fehérjéből, amelynek molekulatömege 80 kDa (80000 g/mol), 20 g/l töménységű oldatot készítünk 20 °C-on. $T = 293\text{ K}$

A.) Mekkora az oldat ionerőssége, ha egy fehérjemolekula 5 Na^+ iont ad le?

$$\begin{aligned} \text{PNa}_5 &\rightarrow \text{P}^{5-} + 5 \cdot \text{Na}^+ \\ c & \quad \quad \quad 5c \\ c &= \frac{20 \text{ g/l}}{80000 \text{ g/mol}} = 2,5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{l}} \\ I &= \frac{1}{2} \sum_i c_i z_i^2 = \frac{1}{2} (c \cdot (5)^2 + 5c \cdot 1^2) \\ I &= \frac{1}{2} (25c + 5c) = \frac{1}{2} 30c = 15c \\ I &= 15 \cdot 2,5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{l}} = 0,00375 \cdot \frac{\text{mol}}{\text{l}} \\ I &= 3,75 \cdot 10^{-3} \text{ M} \quad \checkmark \end{aligned}$$

B.) Mekkora az oldat ozmózisnyomása tiszta vízzel szemben?

$$\begin{aligned} R &= 0,08206 \text{ L atm/K mól} \quad T = 293 \text{ K} \\ \pi &= RT \sum_i c_i \\ \pi &= RT \cdot \frac{6 \cdot 2,5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{l}}}{6c} = 0,03607 \text{ atm} \\ \pi &= \underline{\underline{3,607 \cdot 10^{-2} \text{ atm}}} \quad \checkmark \end{aligned}$$

10p

3.) Az $A \rightleftharpoons B$ reakció standard szabadenergiája (ΔG°) -36 kJ/mol . $= -36 \cdot 10^3 \text{ J/mol}$

A.) Mekkora a reakció egyensúlyi állandója 25°C -on? $T = 298 \text{ K}$

$R = 8,314 \text{ J/K mol}$

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_{\text{eq}} \quad \checkmark$$

$$-\frac{\Delta G^\circ}{RT} = \ln K_{\text{eq}} \quad \checkmark$$

$$K_{\text{eq}} = e^{-\frac{\Delta G^\circ}{RT}} = e^{+\frac{36 \cdot 10^3}{8,314 \cdot 298}} = \underline{\underline{2043868,142}}$$

f_p

B.) Ha A anyag koncentrációja egyenlő B anyag koncentrációjával, mekkora ΔG értéke?
Melyik irányba megy ekkor spontán módon a reakció?

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{(B)}{(A)} \quad \checkmark = -36 \cdot 10^3 \text{ J/mol} + \underbrace{RT \ln 1}_0$$

$$\Delta G = -36 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \quad \checkmark$$

A reakció erre $A \rightarrow B$ irányba megy spontán,
mivel erre $\Delta G < 0$ $\checkmark$

f_p

4.) Egy kémiai reakció sebessége 12-szeresére nő, ha a hőmérsékletet 20°C-ról 30°C-ra emeljük. Ugyanezt a hatást (12-szeres sebességnövekedés) hőmérséklet növelés nélkül, katalizátor alkalmazásával is elérhetjük. Számolja ki a katalizálatlan (a) és a katalizált (b) reakció aktiválási energiáját.

A számításoknál tételezze fel, hogy a preexponenciális tényező (A) nem függ a hőmérséklettől.

$$R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{Kmol}}$$

$$T_1 = 293 \text{ K} \quad T_2 = 303 \text{ K}$$

(a) katalizálatlan

$$12k_1 = k_2$$

$$12 A \cdot e^{-E_a/RT_1} = A \cdot e^{-E_a/RT_2}$$

$$\ln 12 + \frac{-E_a}{RT_1} = \frac{-E_a}{RT_2}$$

$$\ln 12 = E_a \left(\frac{1}{RT_1} - \frac{1}{RT_2} \right)$$

$$\ln 12 = E_a (1,3548 \cdot 10^{-5})$$

$$E_a = 183413,098 \text{ J/mol}$$

$$E_a \approx \underline{\underline{183,413 \text{ kJ/mol}}}$$

10

(b) katalizált eset

$$12 A \cdot e^{-E_a/RT_1} = A \cdot e^{-E_a'/RT_1}$$

$$\ln 12 + \frac{-E_a}{RT_1} = \frac{-E_a'}{RT_1}$$

$$-72,8077 = - \frac{E_a'}{RT_1}$$

$$E_a' = \underline{\underline{177,360 \text{ kJ/mol}}}$$

10

5.) Egy fehérjemolekula denaturációját oldatban a következő egyenlet írja le:
 $N \rightleftharpoons D$, ahol N a natív, D pedig a denaturált fehérjét jelöli.

A.) Adja meg a natív és a denaturált fehérje kémiai potenciáljára vonatkozó egyenleteket! (Hogyan függ a koncentrációtól és milyen állandókat tartalmaz?)

$$\mu_N = \mu_N^\circ + RT \ln X_N \quad \checkmark \quad \mu_N^\circ, \mu_D^\circ \text{ standard kémiai potenciálok}$$

$$\mu_D = \mu_D^\circ + RT \ln X_D \quad \checkmark \quad R: \text{egyetemes gázállandó}$$

$$X_N \approx \frac{C_N}{55,51 M} \quad \checkmark \quad X_D \approx \frac{C_D}{55,51 M} \quad \checkmark \quad \rightarrow \text{egyensúlyban}$$

B.) Egyensúly esetén az összes reaktáns és termék kémiai potenciálja egyenlő. Amennyiben 37 °C-on a fenti reakció egyensúlyban van, a natív forma koncentrációja ezerszerese a denaturált forma koncentrációjának: $C_N = 1000 C_D$. Mennyivel nagyobb a denaturált forma standard kémiai potenciálja (μ_D°), mint a natív formáé (μ_N°)?

$$R = 8,3145 \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$T = 310 \text{ K} \quad \text{egyensúly} \rightarrow \mu_N = \mu_D \quad \checkmark$$

$$\rightarrow \mu_N^\circ + RT \ln \frac{C_N}{55,51 M} = \mu_D^\circ + RT \ln \frac{C_D}{55,51 M}$$

$$\mu_D^\circ - \mu_N^\circ = RT \left(\ln \frac{C_D}{55,51 M} - \ln \frac{1000 C_D}{55,51 M} \right)$$

$$= RT \left(\ln \frac{C_D}{55,51 M} \cdot \frac{55,51 M}{1000 C_D} \right)$$

$$= RT \ln \frac{1}{1000}$$

$$= -17804,705 \text{ J/mol} \quad \checkmark$$

A μ_D° 17804,705 J/mol -al ~~nagyobb~~ ^{nagyobb} ~~mint~~ ^{mint} a μ_N° . 10p