

Kemiallisia esitietoja

Esitietotentissä kerrataan soveltuvin osin kemian peruskurssien¹ asiiasältöjä:

KEMP111 kaasulait, osapaineet, energia, tilafunktiot ja lämpökemia

KEMP112 höyrynpaine, liuokset, reaktiokinetiikka ja termodynamiikka

- 1 a) Sukeltaja on ilmapulloineen (O_2 : 21 til.-%, N_2 : 78 til.-%) 40 m syvyydessä ja 5 bar paineessa. Mikä on typen osapaine keuhkoissa? Miksi sukeltaja ei saa pidättää hengitystään noustessaan kohti pintaa?
 - b) Tarkastellaan kaaasufaasireaktiota $CO + 2 H_2 \rightarrow CH_3OH$. Montako litraa vetykaasua ($M = 4,00 \text{ g/mol}$) tarvitaan 355 K lämpötilassa ja 1 atm paineessa, jotta saamme 35,7 g metanolia ($M = 32,04 \text{ g/mol}$)?
 - c) Laske typen neliöllisen keskinopeuden v_{rms} arvo huoneenlämpötilassa.
 - d) Miten kaasun effuusionopeus riippuu massasta?
- 2 a) Miten käsitteet sisäenergia ja entalpia eroavat toisistaan?
 - b) Paljonko pommikalorimetrin lämpötila nousee, kun 0,003 mol sukroosia palaa reaktiossa $C_{12}H_{22}O_{11} + 12 O_2 \rightarrow 12 CO_2 + 11 H_2O$? Sukroosin $\Delta E_{\text{rxn}} = -5,66 \times 10^3 \text{ kJ mol}^{-1}$ ja kalorimetrin vesiarvo on $C = 4,90 \text{ kJ K}^{-1}$. Kuinka suuri on kalorimetriin siirtyneen lämmön määrä q_{rxn} ?
 - c) Mitä tarkoitetaan kriittisellä pisteellä paine-lämpötiladiagrammissa?
- 3 Mikä selittää eri kaasujen spontaanin sekoittumisen, kun kahta kaasusäiliötä erottava väliseinä avataan?
- 4 Mitä tarkoittaa reaktion kertaluku kemiallisessa kinetiikassa?
- 5 a) Kirjoita tasapainovakion lauseke reaktiolle $4 NO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2 N_2O_5$.
 - b) Miten Gibbsin vapaa energia kuvaa reaktion spontaanisuutta?
- 6 Mitä tekemistä kennopotentialilla on a) Gibbsin energian,
 - b) reaktion tasapainon,
 - c) reaktio-osamäärän kanssa?

¹N. J. Tro, Chemistry: A Molecular Approach; Kpl 5, 6, 11–14, 17, 18.

Matemaattisia esitietoja

Esitietotentissä tarkastellaan oletetusti osattavia laskutoimituksia, esim. kursseilta **FYSP111** funktiot, derivointi ja integrointi, **FYSP113** differentiaaliyhtälö ja sen ratkaisu.

1 a) Sievennä van der Waalsin yhtälö $[p - a(n/V)^2][V - nb] = nRT$ muotoon, jossa ei esiinny V eikä n sijoittamalla moolitilavuus $V_m = V/n$.

b) Ratkaise c yhtälöstä: $\frac{1}{c} - \frac{1}{c_0} = 2kt$.

c) Kirjoita auki summa- ja tulotermit (Σ ja Π) funktioissa f ja g :

$$f(x) = \sum_{n=-1}^1 a_{n+1}x^n, \quad g = \frac{N!}{\prod_{n=0}^2 a_n!}$$

2 a) Derivoi ajan suhteen konsentraatio $c(t) = c_0 \exp(-kt)$.

b) Laske juurifunktion derivaatta: $\frac{d}{dx}(ax^{-1} + b + cx)^{1/2}$.

c) Laske osittaisderivaatta: $\frac{\partial}{\partial y}(4\pi ax)^{-1/2} e^{-y^2/4ax}$.

3 a) Laske integraali: $\int_1^2 (ax^{-1} + b + cx) dx$.

b) Määritä² lukuarvo integraalille: $\int_0^\infty ax^2 e^{-bx} dx$.

4 Reaktiosylinterin tilavuus riippuu sen säteestä r ja korkeudesta h siten, että $V(r, h) = \pi r^2 h$. Tilavuuden (infinitesimaalinen) muutos kirjoitetaan kokonais-differentiaalina

$$dV = \left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_h dr + \left(\frac{\partial V}{\partial h}\right)_r dh.$$

Oletetaan nyt, että dr ja dh ovat mittausvirheitä. Laske suhteellinen virhe dV/V osittaisderivoimalla.

5 a) Osoita, että konsentraatio $c(x, t) = (4\pi Dt)^{-1/2} e^{-x^2/4Dt}$ toteuttaa diffuusioyhtälön

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}.$$

b) Millä J :n arvolla jakaumafunktio $Q(J) = (2J + 1)e^{-BJ(J+1)/kT}$ saa maksimiarvonsa, kun lämpötila $T = 298$ K ja $B/k = 1,44$ K? Pyöristä tulos ($J > 0$).

²Taulukosta (esim. Schaum's Outline of Mathematical Handbook of Formulas and Tables): $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$

Matem. ratkaisut:

1 a) $[p - a/V_m^2][V_m - b] = RT$

b) $c = \frac{c_0}{1+c_0 2kt}$

c) $f(x) = \frac{a_0}{x} + a_1 + a_2 x$, $g = \frac{N!}{a_0! a_1! a_2!}$

2 a) $\frac{dc}{dt} = -kc_0 e^{-kt} = -kc$.

b) $\frac{-ax^{-2}+c}{2(ax^{-1}+b+cx)^{1/2}}$

c) $(4\pi ax)^{-1/2} e^{-y^2/4ax} (-y/2ax)$

3 a) $\left[a \ln x + bx + \frac{cx^2}{2} \right]_1^2 = a \ln 2 + b + \frac{3c}{2}$

b) $a \frac{2}{b^3}$

4 $\frac{dV}{V} = \frac{2dr}{r} + \frac{dh}{h}$

5 a) Yhtälön vasen ja oikea puoli ovat yhtäsuuret:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{e^{-x^2/4Dt}}{\sqrt{4\pi Dt}} \left(-\frac{1}{2t} + \frac{x^2}{4Dt^2} \right) = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

b) $\frac{dQ}{dJ} = 0$, kun $2 + (2J + 1)^2 B/kT = 0$ eli

$$J = -\frac{1}{2} + \sqrt{kT/2B} \approx 10.$$