

10. óraFeladatok MB-statisztika alkalmazására:

- 1.) 1 db fehérjemolekulában kb 1400 db H-kötés van. 37°C-on átlagosan mennyi H-kötés bomlik fel egy molekulában, ha a kötési energia 18,8 $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$?

A feladatban megadott kötési energia 1 mol-ra vonatkozik. 1 db H-híd kötési energiája:

$$E_k = \frac{18,8}{N_A} = \frac{18,8}{6 \cdot 10^{23}} = 3,13 \cdot 10^{-23} \text{ kJ} = 3,13 \cdot 10^{-20} \text{ J}$$

A hőmérsékletet átszámítjuk Kelvinbe:

$$T = 37^\circ\text{C} \approx 310\text{K}$$

Annak valószínűsége, hogy 1 db H-híd felbomlott:

$$\frac{N_1}{N} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_k}{k_B T}} = \frac{e^{-\frac{E_k}{k_B T}}}{e^{-\frac{E_0}{k_B T}} + e^{-\frac{E_k}{k_B T}}} \stackrel{E_0=0}{=} \frac{e^{-\frac{E_k}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{E_k}{k_B T}}} =$$

Felhasználva, hogy $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$ a Boltzmann-faktor kitevője:

$$\frac{E_k}{k_B T} = \frac{3,13 \cdot 10^{-20}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 310} \approx 7,37$$

Így:

$$\frac{N_1}{N} \approx \frac{e^{-7,37}}{1 + e^{-7,37}} \approx 6,62 \cdot 10^{-4}$$

Ezzel átlagosan egy molekulában a felbomlott H-hidak száma:

$$1400 \cdot \frac{N_1}{N} \approx 1400 \cdot 6,62 \cdot 10^{-4} \approx 0,926$$

HF1: Mennyi H-kötés bomlik fel átlagosan egy molekulában 42°C-os láz esetén?

- 2.) Egy NMR¹-ben lévő anyagban hogyan oszlanak meg a hidrogén ionok különböző ($B_1 = 0,2 \text{ T}$ és $B_2 = 3 \text{ T}$) erősségű mágneses térben a felhasadt energia szintek között ($T = 22^\circ\text{C}$ szoba hőmérsékleten)?

Mágneses térben a spinnel rendelkező atommagok hasonlóan működnek, mint a mágneses momentumok: ha a spinek a mágneses tér szerint állnak, az energetikailag kedvezőbb állapotnak számít. A proton (H^+) magspinje: $\frac{1}{2}$.

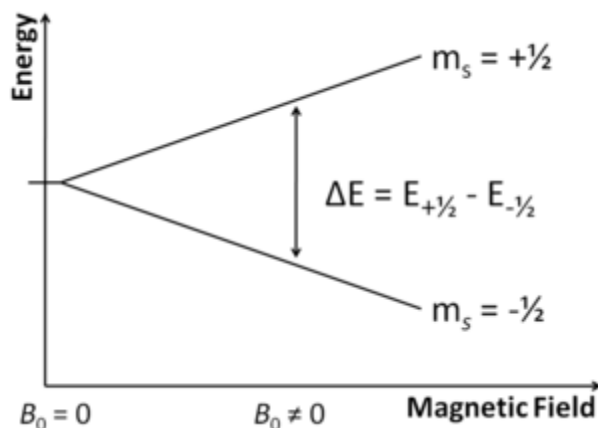
¹ NMR-ről bővebben pl innen: <http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/inside.htm>

Az előbbi példához hasonlóan felírható a $+1/2$ és a $-1/2$ irányba álló atommagok száma:

$$N_{+1/2} = \frac{N}{Z} e^{-\frac{E_{+1/2}}{k_B T}} \quad \text{és} \quad N_{-1/2} = \frac{N}{Z} e^{-\frac{E_{-1/2}}{k_B T}}$$

Ha csak ezek arányát számoljuk, nincs szükségünk se a részecske számra, se az állapotösszegre:

$$\begin{aligned} \frac{N_{+1/2}}{N_{-1/2}} &= \frac{\frac{N}{Z} e^{-\frac{E_{+1/2}}{k_B T}}}{\frac{N}{Z} e^{-\frac{E_{-1/2}}{k_B T}}} = e^{-\frac{E_{+1/2}}{k_B T} - \left(-\frac{E_{-1/2}}{k_B T}\right)} = \\ &= e^{-\frac{E_{+1/2} - E_{-1/2}}{k_B T}} = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} \end{aligned}$$



NRM spektroszkópiában a „jó” irányba állók magok gerjeszthetők térrel ellentétes irányba álló állapotba egy megfelelő frekvenciájú elektromágneses sugárzással:

$$\Delta E = h\nu \quad \underbrace{=}_{\nu = 2\pi\gamma B} \quad \hbar\gamma B,$$

ahol $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ a Planck-állandó, ν a frekvencia és γ a giromágneses faktor, ami protonra: $\gamma_{p^+} = 42,58 \frac{\text{MHz}}{\text{T}}$

Így, felhasználva, hogy $T = 22^\circ\text{C} \approx 295 \text{ K}$ és $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$ kiszámolható ΔE és a nívók közt megoszoló elemek aránya:

$$\begin{aligned} \Delta E_{B=0,2} &= 6,6 \cdot 10^{-34} \cdot 42,58 \cdot 10^6 \cdot 0,2 = 5,6 \cdot 10^{-27} \text{ J} \\ \frac{N_{+1/2}}{N_{-1/2}} &= e^{-\frac{\Delta E_{B=0,2}}{k_B T}} = e^{-\frac{5,6 \cdot 10^{-27}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 295}} = 0,9999986 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{B=3} &= 6,6 \cdot 10^{-34} \cdot 42,58 \cdot 10^6 \cdot 3 = 8,4 \cdot 10^{-26} \text{ J} \\ \frac{N_{+1/2}}{N_{-1/2}} &= e^{-\frac{\Delta E_{B=3}}{k_B T}} = e^{-\frac{8,4 \cdot 10^{-26}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 295}} = 0,9999793 \end{aligned}$$

Megjegyzés: $B = 0,2$ -nél a szükséges frekvencia $\nu_{B=0,2} \approx 8,5 \text{ MHz}$, $B = 3$ -nál $\nu_{B=3} \approx 128 \text{ MHz}$. Mindkét esetben rádiófrekvencia (RF) tartományba esik.

HF2: A 14-es tömegszámú nitrogén esetén mekkora mágneses teret kellene használni, hogy a felhasadás ugyanakkora legyen, mint a proton esetében $B = 0,2 \text{ T}$ -nál?

3.) Szobahőmérsékleten ($T = 22^\circ\text{C}$) a Neon gáznak hányad része van az első gerjesztett állapotban átlagosan, ha tudjuk, hogy az első gerjesztett állapot energiája $E_1 = 16,6 \text{ eV}$ (az alapállapoté pedig $E_0 = 0 \text{ eV}$)?

Az elektronvoltot átszámíthatjuk J-ba: $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ és ismerve a hőmérsékletet ($T = 22^\circ\text{C} \approx 295 \text{ K}$) az előző példához hasonlóan kiszámíthatjuk a gerjesztett és a nem gerjesztett állapotokban levő atomok arányát:

$$\frac{N_{17\text{eV}}}{N_{0\text{eV}}} = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} = e^{-\frac{16,6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 295}} \approx e^{-652,42} = 6,76 \cdot 10^{-291}$$

Tehát igencsak kevés atom van a gerjesztett állapotban – épp ezt várjuk egy nemesgáztól szóba hőmérsékleten.

HF3: Mekkora hőmérsékleten lenne az Argon atomok 1%-a átlagosan az első gerjesztett állapotban?