



Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tematikou

Ročník 23 (2024/2025)

Řešení série 4

Anketa

Milé řešitelky, milí řešitelé, jsme rádi, že se účastníte KSICHTu. Snažíme se, aby Vám řešení úloh nepřineslo jen pochvalu vyučujícího chemie, protože jste řešili úlohy zrovna z jeho předmětu, ale aby Vám seminář přinášel co nejvíce znalostí, možností k zamyšlení a snad i trochu zábavy. Potřebujeme proto znát Váš názor. Byli bychom velmi rádi, kdybyste si našli chvílku na zodpovězení několika otázek¹. Předem Vám děkujeme za pomoc a přejeme Vám hodně úspěchů nejen při řešení KSICHTích úloh.

Staň se KSICHTím organizátorem!

Pro ty z vás, kteří již teď litují, že se s KSICHTem již víckrát nesetkají, neboť opouštějí řady středoškoláků, máme dobrou zprávu. Stačí se stát KSICHTím organizátorem a KSICHT z vašeho života nezmizí. Co pro to udělat? Kontaktujte nás, nebo ještě lépe, zkuste rozpracovat krátkou úlohu o něčem, co vás poslední dobou zaujalo, a pošlete nám ji. Nebojte se, pomůžeme vám s ní, a ještě se přitom naučíte, jak funguje vědecké recenzní řízení (*peer review*), což se vám do života může hodit. Už teď se na vaše e-maily a úlohy těšíme.

Přihláška do 24. ročníku KSICHTu

Přihlašování bude spuštěno v průběhu prázdnin, první sérii očekávejte tradičně začátkem října.

Poděkování

Chod semináře byl podpořen Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci grantu Podpora nadaných žáků základních a středních škol, ev. č. projektu 0009/7/NAD/2024. KSICHT probíhá pod záštitou Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy.



Přejeme vám příjemné prožití letních prázdnin a s mladšími řešiteli se těšíme na shledanou v příštích ročnících KSICHTu. Vám odrostlejšímu řešitelům přejeme hodně úspěchů nejen na vysokých školách a doufáme, že zkušenosti nasbírané při řešení našeho semináře vám budou užitečné v dalším studiu, práci i v životě.

Vaši KSICHTí organizátoři

¹ Odkaz na anketu je zde <https://forms.gle/k2ZdpzGbw5SQoPaQA>

Řešení úloh 4. série 23. ročníku KSICHTu

Úloha č. 1: Alotropické modifikace uhlíku

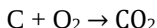
(6 bodů)

Autor: Zdeněk Moravec

1. Antoine Laurent Lavoisier.

[0,25 bodu]

2. Diamant na vzduchu shořel, rovnice je proto velmi jednoduchá:



[0,25 bodu]

3. Diamant: sp^3 ; fullerén C_{60} : sp^2 , grafen: sp^2 , grafan sp^3 , graphyn $\text{sp} + \text{sp}^2$.

[0,5 bodu]

4. Jde o velmi silné oxidační činidlo, které je zároveň poměrně levné a dobře dostupné. Aktivní substancí je oxid manganistý (Mn_2O_7), který vzniká reakcí manganistanu s kyselinou sírovou.

[0,3 bodu]

5. Jde použít například oxid chromový, CrO_3 . Uznána byla každá rozumná odpověď.

[0,3 bodu]

6. Jde o André Geima, který získal, společně se Sirem Michaellem Berrym, Ig Nobelovu cenu za fyziku v roce 2000. Práce, za kterou byla cena udělena, se týkala využití magnetů pro levitaci žáby.

[0,3 bodu]

7. 0D – nanočástice, fullereny; 1D – lineární molekuly, nanotrubičky, nanovlákná, atd.; 3D – běžné bulkové materiály, grafit, diamant.

[0,6 bodu]

8. Nejprve si vypočteme látkové množství uhlíku v 1 g grafenu:

$$n(\text{C}) = \frac{g}{12,011 \text{ g mol}^{-1}} = 0,0833 \text{ mol}$$

Budeme předpokládat, že maximálnímu nasycení odpovídá stav, kdy je na každý uhlík vázán jeden atom vodíku. Látkové množství atomů vodíku bude tedy shodné s $n(\text{C})$. Hmotnost pak vypočítáme snadno:

$$m(\text{H}) = 0,0833 \text{ mol} \cdot 1,01 \text{ g mol}^{-1} = 0,0841 \text{ g vodíku}$$

U výpočtu objemu vodíku musíme uvažovat molekuly H_2 , jejich látkové množství bude poloviční oproti atomům vodíku. Objem plynného vodíku vypočítáme snadno pomocí molárního objemu:

$$n(H_2) = 0,0416 \text{ mol}$$

$$V(H_2) = n(H_2) \cdot V_m = 0,0416 \text{ mol} \cdot 22,414 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} = 0,933 \text{ dm}^3 H_2$$

Pro výpočet objemu kapalného vodíku budeme potřebovat hustotu. Můžeme použít například webbook NISTu:

<https://webbook.nist.gov/cgi/fluid.cgi?Action=Load&ID=C1333740&Type=SatT&PUnit=atm&DUnit=kg/m3>

Pak už je výpočet snadný:

$$V(H_2) = \frac{m}{\rho} = \frac{0,0841 \text{ g}}{0,07085 \text{ g cm}^{-3}} = 1,187 \text{ cm}^3$$

[1,5 bodu]

9. Hlavně reaktivitu substrátu za dané teploty a krystalovou strukturu. Struktura by měla odpovídat struktuře produktu, který chceme na substrátu pěstovat. Důležitý je i poměr teplotní roztažnosti substrátu a produktu. Při špatné volbě může během chlazení dojít k popraskání připraveného filmu.

[1 bodu]

10. Endohedrálční deriváty. Pro popis se používá znak @, například $X@Y$. Nejde samozřejmě o emailovou adresu, ale říkáme tím, že částice X je uvnitř klecovité molekuly Y.

[0,5 bodu]

11. $La@C_{60}$, $La_2@C_{60}$, atd. Zpravidla jde o kov uvnitř fullerenu. Složitější molekuly by nevydržely drsné podmínky syntézy.

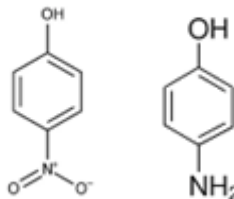
[0,5 bodu]

Úloha č. 2: Athelas

(8 bodů)

Autorka: Martina Kocourková

1. *para*-nitrofenol (vlevo), *para*-aminofenol (vpravo).

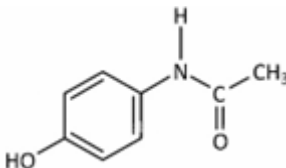


[za každý vzorec 1,5 bodu, celkem 3 body]

2. Slouží k redukci *nitro*-skupiny na *amino*-skupinu.

[0,25 bodu]

3. Paracetamol.



[0,5 bodu]

4. Ibuprofen a kyselina salicylová (a jiná analgetika).

[0,25 bodu]

- 5.

čas (h)	0 (nyní)	před 3 h	před 6 h
koncentrace (mg L ⁻¹)	0,4	0,8	1,6

$$D = V_D \times c = 200 \text{ L} \times 1,6 \text{ mg} = \underline{320 \text{ mg}}.$$

NE, pokud by elf před 6 hodinami dostal dalších 200 mg, byla by maximální dávka překročena o 20 mg.

[1 bod]

6. hobit: $55 \cdot 8,3 = 456,5 \text{ mg h}^{-1}$

skřet: $123 \cdot 7,2 = 885,6 \text{ mg h}^{-1}$

hobit: $500 \text{ mg} : 456,5 \text{ mg h}^{-1} = \underline{1,095 \text{ h}}$

skřet: $500 \text{ mg} : 885,6 \text{ mg h}^{-1} = \underline{0,5645 \text{ h}}$

Účinnější je pro hobity.

[1 bod]

7. Rychlost odbourávání kinetikou prvního řádu nezávisí na hmotnosti člověka.
Výpočet z rychlostní rovnice: $m = m_0 \cdot e^{-k_{el}t}$

po dosazení: $m = 500 \text{ mg} \cdot e^{-0,53 \text{ 1/h} \cdot 6 \text{ h}}$

$m = 20,8 \text{ mg}$

[1 bod]

8. Utlumuje emoce, například smutek, úzkost či radost.

[0,25 bodu]

9. Inhibice cyklooxygenázy (COX).

[0,25 bodu]

10. Zajišťuje přeměnu kyseliny arachidonové na prostaglandiny a tromboxany.

[0,25 bodu]

11. Ihned po požití vysoké dávky kontaktovat lékaře a toxikologické středisko, vyvolat zvracení. Léčba probíhá podáváním acetylcysteinu a aktivního uhlí.

[0,25 bodu]

Úloha č. 3: S odporem o odporu...**(10 bodů)**

Autor: Tomáš Albert Štefanov

1. Odporová konstanta konduktometrické nádoby K_R slouží na přepočítání naměřeného odporu na komůrce na měrnou vodivost roztoku v komůrce. Je definovaná jako poměr mezi vzdáleností elektrod a jejich plochou. Její jednotkou je tedy reciprokový metr – m^{-1} .
2. Pro naši komůrku je teoretická hodnota K_R rovna $83,3 \text{ m}^{-1}$.

$$K_R = \frac{l}{S} = \frac{0,0025}{0,01 \cdot 0,003} = 83,3 \text{ m}^{-1}$$

3. Koncentrace roztoku je $50,3 \text{ mol m}^{-3}$. Měrná vodivost je $0,7535 \text{ S m}^{-1}$.

$$c_{\text{K}^+} = c_{\text{Cl}^-} = \frac{m_{\text{KCl}}}{M_{\text{KCl}}V} = 50,3 \text{ mol m}^{-3}$$

$$\sigma_{\text{TOT}} = \sum_i v_i c_i \lambda_i^\infty = v_{\text{K}^+} c_{\text{K}^+} \lambda_{\text{K}^+}^\infty + v_{\text{Cl}^-} c_{\text{Cl}^-} \lambda_{\text{Cl}^-}^\infty = 0,7535 \text{ S m}^{-1}$$

4. Odpor komůrky je $117,59 \Omega$. Odporová konstanta nádoby $K_R = 88,6 \text{ m}^{-1}$.

$$R_2 = \frac{|V_{\text{out}}|}{|V_{\text{in}}|} R_1 = \frac{534,5}{1000} 220 = 117,59 \Omega$$

$$K_R = R_2 \sigma_{\text{TOT}} = 117,59 \cdot 0,7535 = 88,6 \text{ m}^{-1}$$

5. Odpor komůrky je 715Ω . Měrná vodivost roztoku je $0,1239 \text{ S m}^{-1}$.

$$R_2 = \frac{|V_{\text{out}}|}{|V_{\text{in}}|} R_1 = \frac{3250}{1000} 220 = 715 \Omega$$

$$\sigma_{\text{TOT}} = \frac{K_R}{R_2} = \frac{88,6}{715} = 0,1239 \text{ S m}^{-1}$$

Koncentrace sodných a dusičnanových iontů je stejná jako koncentrace soli. Koncentrace NaNO_3 je tedy $10,2 \text{ mol m}^{-3}$.

$$c_{\text{NaNO}_3} = \frac{\sigma_{\text{TOT}}}{v_{\text{Na}^+} \lambda_{\text{Na}^+}^\infty + v_{\text{NO}_3^-} \lambda_{\text{NO}_3^-}^\infty} = \frac{0,1239}{0,01215} = 10,2 \text{ mol m}^{-3}$$

6. První krok řešení spočívá v přepočtu dat na tabulku měrné vodivosti roztoku v závislosti na přidávaném objemu hydroxidu. Následně proložíme lineární oblasti klesající a stoupající vodivosti lineárními funkcemi a vypočteme bod ekvivalence jako objem hydroxidu, při kterém se fitované křivky protnou (viz obrázek 1). Tvar lineárních rovnic $y = ax + b$ vede na výsledek

$$V_{\text{addNaOH}} = \frac{b_2 - b_1}{a_1 - a_2} = \frac{-27,008 - 155,74}{-30,475 - 11,966} = 4,306 \text{ ml}$$

Bod ekvivalence činí $V_{\text{addNaOH}} = 4,306 \text{ ml}$. Z látkové bilance dopočítáme koncentraci protonů, která je rovna koncentraci kyseliny.

$$c_{\text{kys}} = \frac{c_{\text{NaOH}} V_{\text{addNaOH}}}{V_{\text{kys}}} = \frac{10 \cdot 4,306}{10} = 4,3 \text{ mmol dm}^{-3}$$

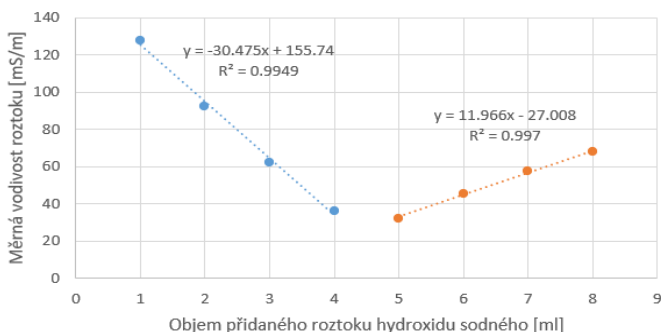
Koncentrace kyseliny je $4,3 \text{ mmol dm}^{-3}$. Pro bod s nejmenší vodivostí ($V_{\text{addNaOH}} = 5 \text{ ml}$) si vypočítáme koncentrace jednotlivých iontů v roztoku. Tyto koncentrace jsou $c_{\text{Na}^+} = 3,33 \text{ mmol dm}^{-3}$, $c_{\text{OH}^-} = 0,46 \text{ mmol dm}^{-3}$, $c_{\text{anion}} = 2,87 \text{ mmol dm}^{-3}$, $c_{\text{H}^+} = 0 \text{ mmol dm}^{-3}$. Z Kohlrauschova zákona a znalosti vodivosti roztoku potom spočítáme limitní molární vodivost pro náš neznámý anion.

$$R_2 = \frac{|V_{\text{out}}|}{|V_{\text{in}}|} R_1 = \frac{2302}{1000} 1200 = 2762,4 \Omega$$

$$\sigma_{\text{TOT}} = \frac{K_R}{R_2} = \frac{88,6}{2762,4} = 32,07 \text{ mS m}^{-1}$$

$$\lambda_{\text{anion}} = \frac{\sigma_{\text{TOT}} - v_{\text{OH}^-} c_{\text{OH}^-} \lambda_{\text{OH}^-}^{\infty} - v_{\text{Na}^+} c_{\text{Na}^+} \lambda_{\text{Na}^+}^{\infty}}{v_{\text{anion}} c_{\text{anion}}} = 3,61 \text{ mS m}^2 \text{ mol}^{-1}$$

Naše neznámá látka je tedy kyselina propansulfonová.



Obrázek 1: Konduktometrická titrace kyseliny hydroxidem sodným

7. Uvědomíme si, že jde o hydrolýzu terciálního halogenderivátu. Každý organik Vám potvrdí, že tato reakce bude typu S_N1 , což nám automaticky říká, že jde o **reakci prvního řádu**. Dále si musíme uvědomit, že vodivost je přímo úměrná koncentraci iontů a vznikající HBr (produkt) nám ve vodném roztoku disociuje

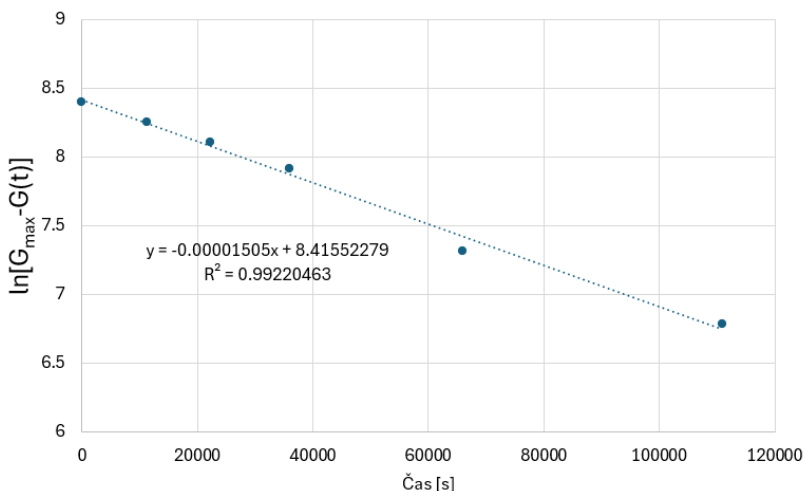
a zvyšuje vodivost. Nárůst vodivosti je tedy přímo úměrný nárůstu koncentrace produktu. Naopak koncentrace reaktantu je nepřímo úměrná vodivosti. Rychlostní konstantu můžeme určit jako směrnici lineární závislosti přirozeného logaritmu koncentrace reaktantu (úměrné rozdílu maximální a aktuální vodivosti) vůči času (viz obrázek 2). Rychlostní rovnice prvního řádu bude mít tvar:

$$G_{\max} - G(t) = G_{\max} \exp(-kt)$$

Linearizovaný vztah bude mít potom tvar:

$$\ln(G_{\max} - G(t)) = -kt + \ln(G_{\max})$$

Rychlostní konstanta nám vyjde $k = 0,000015 \text{ s}^{-1}$.



Obrázek 2: Konduktometrické měření hydrolýzy *terc*-butylbromidu

Úloha č. 4: Olovnatá

(11 bodů)

Autor: Josef Vondruška

1. Vznikající kyselina octová ve víně reaguje s olovem za vzniku acetátu (octanu) olovnatého, který vykazuje sladkou chuť.

[0,25 bodu]

2. Kosti: olovo se ukládá do kostí, snižuje jejich pevnost a může se pak uvolnit do krve.

Kostní dřeň: olovo narušuje syntézu hemu a krvetvorbu.

Mozek a nervová soustava: olovo poškozuje neurony a paměť, také vede k melancholickým stavům a k oslabení kognitivních funkcí.

[1 bod]

3. Intoxikace olovem ovlivňuje krvetvorbu, což vede k chudokrevnosti (anémii).

[0,25 bodu]

4. a) Kyselina δ -aminolevulová, koproporfyryl (III)

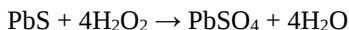
b) Tato kyselina je výchozí látkou pro syntézu porfyrinového kruhu, což v lidském těle vede k syntéze hemu a následně hemoglobinu.

[0,25 bodu + 0,25 bodu]

5. a) Bílá: olověná běloba, $2 \text{PbCO}_3 \cdot \text{Pb(OH)}_2$.

Žlutá: chromová žlut', PbCrO_4 .

Červená: suřík, Pb_3O_4 .



[0,5 bodu + 1 bod]

6. a) Srovnání je provedeno v tabulce.

kov	cena	bezpečnost	bod tání
olovo	nízká	toxické	327,5 °C
železo	nízká	bezpečné	1538 °C
cín	střední	bezpečný	231,9 °C
zlato	vysoká	bezpečné	1064 °C

- b) Nejvhodnější náhradou je cín.

[0,5 bodu + 0,25 bodu]

7. a) Olovo na sebe váže volné radikály, čímž se snižuje zápalnost benzínu.
 b) Oktanové číslo je míra odolnosti paliva proti detonaci při spalování v motoru. Natural 95 má vyšší oktanové číslo (je více odolný vůči detonaci/samovznícení/klepání motoru).
 c) $(C_2H_5)_4Pb + 13O_2 \rightarrow Pb + 8CO_2 + 10H_2O$ nebo
 $2(C_2H_5)_4Pb + 27O_2 \rightarrow PbO + 16CO_2 + 20H_2O$
 d) Organické bromidy, reagují s Pb a PbO a těkavý bromid olovnatý snadno uniká z motoru pryč.
 e) Umožňují rozpustnost olova v benzínu.
 f) Rozsáhlé uvolňování olova do přírody.

[0,5 bodu + 0,5 bodu + 0,5 bodu + 0,5 bodu + 0,5 bodu + 0,5 bodu]

8. Olovo se podobá vápníku, který děti vstřebávají ve větší míře pro správný vývoj kostí.

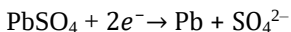
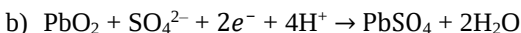
[0,5 bodu]

9. Jaderný průmysl: ochranný materiál (pohlcuje gama záření).

Sklářský průmysl: křišťálové sklo, olovnaté glazury (velký index lomu světla).

[0,25 bodu + 0,5 bodu]

10. a) Stačí jen převést Ah na C, $Q = 100 \text{ Ah} = 100 \cdot 3600 \text{ C} = 360000 \text{ C}$



Faradayův zákon elektrolýzy: $m = \frac{M \cdot Q}{n \cdot F}$:

$M_{Pb} = 207,2 \text{ g/mol}$

$Q = 360000 \text{ C}$

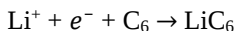
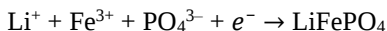
$n = 2$

$F = 96485 \text{ C/mol}$

$m_{Pb^{2+}} = 2 \cdot \frac{M \cdot Q}{n \cdot F} = 2 \cdot \frac{207,2 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot 360000 \text{ C}}{2 \cdot 96485 \frac{\text{C}}{\text{mol}}} = \text{cca } 773,1 \text{ g}$ (násobí se 2, protože počítáme reakce na obou elektrodách)

- c) Například akumulátor o hmotnosti 25 kg, aktivní hmotnost tvoří cca 3,1 %.

- d) Poločláňkové reakce na katodě se účastní jeden elektron. Na anodě se poločláňkové reakce účastní rovněž jeden elektron.



- e) Výpočet:

Faradayův zákon elektrolýzy: $m = \frac{M \cdot Q}{n \cdot F}$:

$$M_{\text{Li}} = 6,94 \text{ g/mol}$$

$$M_{\text{Fe}} = 55,85 \text{ g/mol}$$

$$Q = 360000 \text{ C}$$

$$n = 1$$

$$F = 96485 \text{ C/mol}$$

$$m_{\text{Li}^+} = \frac{M \cdot Q}{n \cdot F} = \frac{6,94 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot 360000 \text{ C}}{96485 \frac{\text{C}}{\text{mol}}} = \text{cca } 25,9 \text{ g}$$

$$m_{\text{Fe}^{3+}} = \frac{M \cdot Q}{n \cdot F} = \frac{55,85 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot 360000 \text{ C}}{96485 \frac{\text{C}}{\text{mol}}} = \text{cca } 208,4 \text{ g}$$

$$m = m_{\text{Li}^+} + m_{\text{Fe}^{3+}} = 234,3 \text{ g}$$

Například akumulátor o hmotnosti 10,2 kg, aktivní hmotnost tvoří cca 2,3 %.

- f) Lithiové baterie nefungují při nízkých teplotách, jsou dražší, hůře se recyklují, při vznícení téměř nejdou uhasit a nezvládají cyklické nabíjení/vybíjení.

$$[0,25 \text{ bodu} + 0,5 \text{ bodu} + 0,25 \text{ bodu} + 0,5 \text{ bodu} + 0,5 \text{ bodu} + 0,5 \text{ bodu}]$$

Odkazy

Olověný akumulátor: <http://bit.ly/3XxyFsw>

Lithiový akumulátor: <https://bit.ly/4hj3bNQ>

Úloha č. 5: Neideální II**(11 bodů)**

Autor: Jan Vavřín

1. a) m^{-3}

[0,25 bodu]

b) Ze stavové rovnice získáme

$$p_i = \frac{N_i k_B T}{V} = n_i k_B T$$

a to můžeme dosadit do vztahu (1).

$$K = \frac{p_B p^\circ}{p_A^2} = \frac{n_B k_B T p^\circ}{n_A^2 k_B^2 T^2} = \frac{n_B}{n_A^2} \cdot \frac{p^\circ}{k_B T}$$

Zjevně tedy platí

$$n^\circ = \frac{p^\circ}{k_B T}$$

[0,75 bodu]

c) Chybu jsme udělali v poslední větě – p° by sice byl $92\times$ větší, ale i rovnovážná konstanta by se $92\times$ zvětšila. Tyto dva efekty se přesně vykrátí a my dostaneme stejný výsledek nezávisle na standardním stavu.

Z rovnice $K = e^{-\Delta G^\circ/RT}$ je vidět, že rovnovážná konstanta závisí na *standardní* Gibbsově energii, tedy změně Gibbsovy energie uvažující reaktanty i produkty ve *standardním stavu*. Pokud změníme standardní stav, změní se i standardní Gibbsova energie.

[0,75 bodu]

2. a) Můžeme dosadit do vzorečku pro $W(N, N_A, N_B)$ nebo uvažovat, že jedna kulička může být na N různých místech. V obou případech dostaneme $W = N$, a tedy $S = k_B \ln N$.

[0,25 bodu]

b) Opět můžeme dosadit nebo si říci, že dimer má jen $N - 1$ možných poloh. Díky předpokladu v úloze můžeme psát $S = k_B \ln(N - 1) \approx k_B \ln N$.

[0,3 bodu]

c) Entropie se sčítají, takže

$$\Delta S = S_B - 2S_A = k_B \ln N - 2k_B \ln N = -k_B \ln N.$$

[0,5 bodu]

- d) Vznikne jedna vazba, takže $\Delta E = -\varepsilon$.

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S = -\varepsilon + k_B T \ln N$$

$$K = e^{-\Delta F/k_B T} = e^{\varepsilon/k_B T} e^{-\ln N} = \frac{1}{N} e^{\varepsilon/k_B T}$$

[0,85 bodu]

3. a) Standardní „hustota počtu částic“ je 1 molekula v N políčkách mřížky. Tedy

$$n^\circ = \frac{1}{N}.$$

[0,25 bodu]

- b) Dosadíme do vztahu pro rovnovážnou konstantu z úlohy 1,

$$\frac{n_B n^\circ}{n_A^2} = \frac{1}{N} e^{\varepsilon/k_B T} = n^\circ e^{\varepsilon/k_B T}.$$

Vydělíme obě strany n° a získáme kýžený výsledek.

[0,5 bodu]

4. a) Je to v analogie vztahu $\Delta G = 0$ pro chemickou rovnováhu. Říká nám, že v rovnováze musí volná energie zůstat stejná, pokud proběhne jeden ekvivalent reakce – tedy pokud se dvě molekuly monomeru změní na dimer.

Pokud se tak stane, počet monomerů klesne z N_A na $N_A - 2$ a počet dimerů stoupne z N_B na $N_B + 1$.

[0,5 bodu]

- b) i) Energie E je prostě vazebná energie vynásobená počtem dimerů. Tedy

$$E = -N_B \varepsilon$$

[0,25 bodu]

- ii) Pro entropii jen spojíme dva vzorečky z první části úlohy.

$$S = k_B \ln W = k_B \ln \frac{(N - N_B)!}{N_A! N_B! (N - N_A - 2N_B)!}$$

[0,35 bodu]

- c) Z výsledků v (b) máme

$$F(N_A, N_B) = -N_B \varepsilon - k_B T \ln \frac{(N - N_B)!}{N_A! N_B! (N - N_A - 2N_B)!}.$$

Tento vztah využijeme vztah i pro $F(N_A - 2, N_B + 1)$ a můžeme dosadit do (4). Dále se zbavíme logaritmů a dostaneme

$$\frac{(N - N_B)!}{N_A! N_B! (N - N_A - 2N_B)!} = e^{\varepsilon/k_B T} \frac{(N - N_B - 1)!}{(N_A - 2)! (N_B + 1)! (N - N_A - 2N_B)!},$$

což můžeme dále upravit na

$$\frac{(N - N_B)!}{(N - N_B - 1)!} = e^{\varepsilon/k_B T} \frac{N_A!}{(N_A - 2)!} \cdot \frac{N_B!}{(N_B + 1)!}.$$

To už ale můžeme upravit pomocí vztahů pro faktoriály na

$$N - N_B = e^{\varepsilon/k_B T} \cdot \frac{N_A(N_A - 1)}{N_B + 1},$$

což nám po jednoduché úpravě poskytne vztah v zadání.

[2 body]

- d) Pak máme $N_A - 1 \approx N_A$ a $N_B + 1 \approx N_B$, takže

$$\frac{(N - N_B)N_B}{N_A^2} = e^{\varepsilon/k_B T}.$$

Pokud zlomek zkrátíme číslem N^2 a využijeme definici „hustoty počtu částic“, získáme vztah (3).

[0,75 bodu]

5. a) Zanedbali jsme vzájemné odpuzování kuliček. V podstatě jsme tedy předpokládali, že se A a B chovají ideálně.

[0,5 bodu]

- b) Protože látka A zabírá jedno místo a látka B dvě místa, je počet volných míst v mříže, tedy „dostupný objem“, roven $N - N_A - 2N_B$. $1 - n_A - 2n_B$ je pak zlomek celkového objemu, který je pro částici opravdu dostupný. Aktivita látky A je (stejně jako v první části) skoro jako ideální aktivita, jen místo hustoty počtu částic n_A máme hustotu počtu částic v dostupném objemu.

Můžete si všimnout, že aktivita látky B je složitější. To souvisí s úvahami v první části, kde jsme zjistili, že přítomnost B má složitější vliv na dostupný objem pro další molekuly B.

Konkrétněji, faktor $(1 - n_A - 2n_B)^2$ je jen kvůli tomu, že molekuly B zabírají dvě místa. Faktor $1 - n_B$ říká, že – pro konstantní zaplnění mřížky – je aktivita B *nižší*, pokud máme B *více*. To odráží fakt, že B efektivně zabírá méně místa pro další molekuly B.

Tam jsme ale také usoudili, že přítomnost B nemá žádný zvláštní vliv na dostupný objem pro látku A. Úvahy z otázky 4 proto platí na látku A i v přítomnosti B.

[0,75 bodu]

- c) Protože všechna místa jsou obsazena kuličkami, tak platí $N_A + 2N_B = N$, neboli $n_A + 2n_B = 1$.

Z $\varepsilon = 0$ také máme, že $e^{\varepsilon/k_B T} = 1$. Pokud označíme n_B jako x a dosadíme do (2) a (3), musíme vyřešit rovnice

$$\frac{x}{(1-2x)^2} = 1 \quad \text{a} \quad \frac{x(1-x)}{(1-2x)^2} = 1$$

To jsou jednoduché kvadratické rovnice, jejichž řešeními jsou

$$x = 1/4 = 0,25 \quad \text{a} \quad x = \frac{5-\sqrt{5}}{10} \approx 0,28.$$

Druhá řešení těchto rovnic nedávají smysl. Pro hustotu částic B musí platit $x \leq 0,5$ (ne $x \leq 1$, protože B zabírá dvě místa).

Vidíme tedy, že ve skutečnosti dostaneme více B než v ideálním případě. To souhlasí s úvahami v úloze 5 – při takto vysokých koncentracích je vyšší tendence tvořit látku, která zabírá „méně místa“, tedy dimer B.

[1,5 bodu]