



— ARIKETAK —

1 Laborategi baten entzima batek katalizatutako erreakzioa burutu da. Bertan sustratuak (erreaktibo) antibiotiko bat ematen du produktu gisa. Mota honetako erreakzioen zinetika, ondoko formulaz adierazi ohi dira:

$$-r_s = \frac{k_1 C_s}{1 + k_2 C_s}$$

Erreaktore ez-jarrai batean, 36°Ctan, sustratuaren kontzentrazioaren datuak denboraren funtzio jaso ditugu, erreakzio inguruko beste osagaien kontzentrazio eta baldintzak konstante mantenduz. Kalkulatu k_1 eta k_2 -ren balioak. Excel eta Scilab erabili kalkulu tresna gisa.

t, min	$C_s, \text{mmol } \Gamma^{-1}$	t, min	$C_s, \text{mmol } \Gamma^{-1}$	t, min	$C_s, \text{mmol } \Gamma^{-1}$
0	0.313	5	0.180	12	0.061
1	0.284	6	0.158	15	0.035
2	0.256	7	0.138	20	0.012
3	0.229	8	0.119	25	0.004
4	0.204	10	0.087	30	0.001

2 Aurreko ariketako datuak polinomio erako kurba bati doitu nahi diogu. Errezena parabola (2. mailako polinomioa) bati doitzea izango litzateke, baina doiketa egokia izango ote den ziur ez gaudenez, 3. eta 4. mailako polinomioei ere doitu diegu.

$$C_s = b_0 + b_1 t + b_2 t^2$$

$$C_s = b_0 + b_1 t + b_2 t^2 + b_3 t^3$$

$$C_s = b_0 + b_1 t + b_2 t^2 + b_3 t^3 + b_4 t^4$$

Hiru doiketa hauek egin eta errepresentatu lortutako polinomio-kurba datu esperimentalekiko. Esan zein den egokiena eta zergaitik. Excel eta Scilab erabili kalkulu tresna gisa



— ARIKETAK —

3 Analisisetarako laborategi bateko arduraduna zara eta lagin mota berri bat ekarriko analizatu behar duzula agindu dizute. Lagin berri hauek, uretan disolbatuta sodio hidroxidoa eta sodio azetato konposatuak ditu. Bibliografian hauen kontzentrazioa nola neurtu bila ibili ondoren, ondoko ondorioak atera dituzu: *Sodio hidroxidoa eta etil azetatoa konposatu ionikoak izanda, hauen kontzentrazioa disoluzioaren eroankortasunarekin zuzenki erlazionatuta daude. Sodio hidroxidoa etil azetatoa baino eroale hobea da; ondorioz eroankortasunaren eta konposatu bakoitzaren kontzentrazioaren arteko erlazioa desberdina da.*

Diso.	C(NaOH) l/mol	C(AcNa) l/mol	χ mS/cm
1	0.1000	0.0000	21.60
2	0.0833	0.0167	19.54
3	0.0714	0.0286	17.33
4	0.0625	0.0375	15.90
5	0.0556	0.0444	14.60
6	0.0500	0.0500	13.48
7	0.0000	0.1000	6.73
8	0.0167	0.0833	9.43
9	0.0286	0.0714	11.21
10	0.0375	0.0625	12.12
11	0.0444	0.0556	13.60
12	0.0000	0.0000	1.44E-03

$$\chi_i = K_i \cdot C_i;$$

Hortaz, eroankortasun osoa: $\chi = \chi_{OH^-} + \chi_{Ac^-} = K_{OH^-} \cdot C_{OH^-} + K_{Ac^-} \cdot C_{Ac^-}$.

K_{OH^-} eta K_{Ac^-} kalkulatzeko, laborategian kontzentrazioa desberdineko disoluzioak prestatu dituzu eta disoluzio hauen kontzentrazioa neurtu duzu. Emaitzak ondoko taulan azaltzen dira: Zenbat balio dute K_{OH^-} eta K_{Ac^-} ? Excel eta Matlab erabili kalkulu tresna gisa

Emaitza: $K_{OH^-} = 215,63 \text{ microS} \cdot \text{m}^2/\text{mol}$ $K_{Ac^-} = 67,14 \text{ microS} \cdot \text{m}^2/\text{mol}$

4 Mekanismo ezaguna (ekuazioa zinetikoaren itxura baita) duen erreakzio baten parametro zinetikoak kalkulatu nahi ditugu.

$$-r_A = k_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) (C_A^2 - fC_A)$$

Erreakzioak gure laborategietan egin izan bagenu, tenperatura (edo kontzentrazioa) jakin batean esperimendu bat baino gehiago egingo genuke, aktibazio-energia Arrhenius-en ekuazioaren bitartez kalkulatzeko. Tamalez, esperimentuak kanpoko laborategi batek egin ditu hauexek dira bidali dizkiguten datuak:

T, K	$C_A, \text{mol l}^{-1}$	$-r_A, \text{mol l}^{-1} \text{s}^{-1}$	T, K	$C_A, \text{mol l}^{-1}$	$-r_A, \text{mol l}^{-1} \text{s}^{-1}$
303	1,010	0,060	323	0,312	0,120
308	0,802	0,080	328	0,422	0,351
313	0,897	0,188	333	0,350	0,473
318	0,504	0,136	338	0,112	0,170

Kalkula itzazu aktibazio energia, faktore aurre-exponentziala eta f faktorea (tenperaturarekiko independentea).

Emaitza: $25.5 \text{ kcal mol}^{-1}$